

Міністерство освіти і науки України  
Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя

**ПЕТРИК М.Р., ВАСИЛЮК П.М.,  
МИХАЛИК Д.М., БАБІЙ Н.В., ПЕТРИК О.Ю.**

**МОДЕЛІ ПРОЦЕСІВ ДИФУЗІЙНОГО ПЕРЕНОСУ І  
МЕТОДИ ОЦІНЮВАННЯ ПАРАМЕТРІВ В  
БАГАТОКОМПОЗИТНИХ НАНОПЛІВКАХ**

**Тернопіль  
2015**

**УДК 519.144**  
**ББК 519.4**  
**Б30**

*Рекомендовано до друку вченою радою Тернопільського національного  
технічного університету імені Івана Пулюя  
протокол № 1 від 10 лютого 2015 р.*

Рецензенти:

*В.А. Стоян, докт. фіз.-мат. наук, проф.,  
Є.Ф. Галба, докт. фіз.-мат. наук.*

Іл. 92. Бібліогр. 204 назв

**ПЗ0** Петрик М.Р. Моделі процесів дифузійного переносу і методи оцінювання параметрів в багатокомпонентних наноплівках : монографія / М.Р. Петрик, П.М. Василюк, Д.М. Михалик, Н.В. Бабій, О.Ю. Петрик. – Тернопіль : Вид-во ТНТУ імені Івана Пулюя, 2015. – 176 с.

**ISBN 978-966-305-071-3**

В монографії представлені математичні моделі фізико-технологічних процесів перенесення в багат шарових плівках декартового та циліндричного типу, моделі дифузійного переносу в багат шарових оксидних та Fe/Tb, Dy/Fe - магнітних наноплівках різної конфігурації з урахуванням взаємодій між окремими шарами плівок. Наведено результати комп'ютерного моделювання та аналіз концентраційних залежностей дифундованих компонентів у шарах наноплівок як функцій від товщини для різних зрізів технологічних поверхонь, що дає можливість їх подальшого використання для комплексної оцінки ресурсозбереження, зокрема показників корозійності та жаростійкості оксидних плівок при виробництві тонких скловолокон.

Для наукових працівників, фахівців у галузі прикладної математики, математичного моделювання, програмної інженерії, викладачів вищих навчальних закладів, аспірантів, інженерів та студентів, що цікавляться питаннями створення програмного забезпечення для моделювання та ідентифікації масопереносу в нанопористих середовищах та суміжними напрямками.

**УДК 519.4**  
**ББК 22.144**

© М.Р. Петрик, П.М. Василюк, Д.М. Михалик,  
Н.В. Бабій, О.Ю. Петрик, 2015

© Тернопільський національний технічний  
університет імені Івана Пулюя, 2015

**ISBN 978-966-305-071-3**

## ЗМІСТ

Передмова	6
<b>РОЗДІЛ 1. ТЕНДЕНЦІЇ РОЗВИТКУ МАТЕМАТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ДИФУЗІЙНОГО ПЕРЕНЕСЕННЯ В БАГАТОШАРОВИХ СЕРЕДОВИЩАХ</b> .....	<b>8</b>
1.1. Аналіз результатів сучасних експериментальних нанofізичних досліджень в галузі створення багатошарових наноплівки та нанокompозитів.....	8
1.2. Особливості крайових задач дифузійного переносу в тонких багатошарових магнітних середовищах.....	27
<b>РОЗДІЛ 2. МЕТОДИ МАТЕМАТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ В ЗАДАЧАХ ДИФУЗІЙНОГО МАСОПЕРЕНОСУ З СПЕКТРАЛЬНИМ ПАРАМЕТРОМ В БАГАТОІНТЕРФЕЙСНИХ НЕОДНОРІДНИХ ЦИЛІНДРИЧНИХ СЕРЕДОВИЩАХ</b> .....	<b>33</b>
2.1. Скінченні інтегральні перетворення типу Ганкеля першого роду і другого роду для однорідних циліндричних середовищ переносу.....	33
2.1.1. Скінченне інтегральне перетворення типу Ганкеля 1-го роду для однорідного обмеженого циліндричного середовища.....	33
2.1.2. Скінченне інтегральне перетворення типу Ганкеля 2-го роду для однорідного обмеженого циліндричного середовища.....	37
2.2. Скінченне гібридне інтегральне перетворення типу Ганкеля першого роду для обмежених неоднорідних n-складових циліндричних середовищ.....	44
<b>РОЗДІЛ 3. ОСНОВИ МЕТОДОЛОГІЇ МОДЕЛЮВАННЯ ДИФУЗІЙНОГО ПЕРЕНЕСЕННЯ В БАГАТОШАРОВИХ НАНОПЛІВКАХ</b> .....	<b>62</b>
3.1. Структура багатошарових магнітних середовищ.....	62
3.2. Двовимірні моделі для прогнозування процесів дифузійного перенесення в обмежених багатоскладових магнітних середовищах з використанням інтегрального перетворення Фур'є.....	68
3.3. Застосування інтегрального перетворення Фур'є функцій, заданих в напівобмежених просторах, для моделювання процесів дифузійного перенесення в багатошарових магнітних наноплівках.....	72
3.4. Двовимірні моделі процесів дифузійного перенесення в багатошарових магнітних середовищах циліндричної конструкції з викорис-	

танням інтегральних перетворення типу Фур'є – Бесселя.....	77
3.4.1. Модель дифузійного перенесення в напівобмежених багатосфери-вих (по радіальній координаті $r$ ) середовищ.....	77
3.4.2. Модель дифузійного перенесення в напівобмежених багатосфери-вих (по радіальній координаті $r$ ) середовищах з порожниною.....	81
3.4.3. Двовимірні моделі для прогнозування процесів дифузійного перенесення в багатоскладових середовищах з використанням інтегрального перетворення Бесселя і Фур'є.....	83
3.5. Моделювання процесів дифузійного переносу в тонких нанокон- позитах із використанням інтегрального перетворення типу Конторовича- Лебедева.....	86
3.5.1. Моделі процесів дифузійного перенесення в однорідних обмеже- них середовищах з використанням інтегрального перетворення типу Кон- торовича-Лебедева.....	87
3.5.2. Моделі процесів дифузійного перенесення в двоскладових напівоб- межених середовищах з використанням інтегрального перетворення типу Конторовича-Лебедева.....	90
3.5.3. Моделі процесів дифузійного перенесення в обмежених двоскладових середовищах з використанням інтегрального перетворення типу Конторовича-Лебедева, Лежандра ( $KL1 * L2$ ).....	92
<b>РОЗДІЛ 4. МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ДИFUZІЙНОГО ПЕРЕНЕСЕННЯ В БАГАТОШАРОВИХ НАНОПЛІВКАХ РІЗНОЇ КОНФІГУРАЦІЇ.....</b>	<b>96</b>
4.1. Математичне моделювання дифузійного переносу в багатосфери- вих Fe/Dy – магнітних наноплівках різної конфігурації.....	96
4.1.1. Фізична задача і математична модель процесу дифузії в багатосфери-вих системах.....	96
4.1.2. Перевірка моделі на адекватність даним фізичного експерименту з використанням методів зворотніх задач.....	103
4.1.3. Моделювання та аналіз модельних і експериментальних профілів концентрацій.....	107
4.2. Математичне моделювання концентраційних розподілів Fe/Tb - магнітних багатоскладових середовищ.....	110
4.2.1. Фізико-математичний опис проблеми та алгоритмізація аналітичного розв'язку.....	110

4.2.2. Моделювання та аналіз модельних та експериментальних профілів концентрацій.....	115
4.3. Математичне моделювання дифузійного перенесення в багатошарових наноплівках оксидної структури.....	122
4.3.1. Математичне моделювання дифузійного перенесення в багатошарових наноплівках оксидної структури при дослідженні зразка за технологією виробництва базальтового волокна (БСТВ).....	123
4.3.2. Математичне моделювання дифузійного перенесення в багатошарових наноплівках оксидної структури при дослідженні зразка за технологією виробництва базальтового волокна, отриманого вертикальним роздувом повітря (ВРВ).....	137
<b>РОЗДІЛ 5. МОДЕЛЮВАННЯ ТА ІДЕНТИФІКАЦІЯ ПАРАМЕТРІВ ПРОЦЕСІВ ДИФУЗІЙНОГО ПЕРЕНЕСЕННЯ В БАГАТОШАРОВИХ ОКСИДНИХ НАНОПЛІВКАХ.....</b>	<b>142</b>
5.1. Математичне модель багатошарової оксидної наноплівки.....	142
5.2. Побудова аналітичного розв'язку моделі.....	144
5.3. Вибір функціоналу-нев'язки.....	147
5.4. Ідентифікація та чисельне моделювання.....	148
Висновки.....	154
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ.....	156

## ПЕРЕДМОВА

Важливим напрямом ресурсозбереження та підвищення технологічних характеристик матеріалів є застосування наноплівки та нанопокриття різного призначення. Останні є багат шаровими наносередовищами, що характеризуються неоднорідністю фізичних властивостей (механічних, дифузійних, електричних, магнітних, оптичних). Вони широко використовуються як конструкційні ресурсозберігаючі матеріали в напівпровідниковій та електронній промисловості (для нових поколінь запам'ятовуючих пристроїв та мікросхем), атомній енергетиці, як нанопокриття робочих органів обладнання для виробництва скловолоконних, мікропористих фільтрувальних матеріалів тощо.

Це зумовило за останні роки ріст експериментальних та теоретичних досліджень дифузійної кінетики багат шарових наноконструкцій, що дає можливість одержання на базі матеріалів з відомими властивостями нових матеріалів, створення яких пов'язане зі структурними змінами при агрегуванні наночастинок з різними властивостями. Зокрема, при агрегації (Fe/Dy), (Fe/Tb)-магнітних багат шарових наноплівки виявлені значні ефекти магнетострикції (стискання зразків). Цей фізичний ефект спричинений системою інтерфейсних взаємодій між складовими елементами (наночастинами) середовища та дисиметрією дифузійного масоперенесення в середовищі атомів для різних наночастинок. Проведені експерименти, що стосуються створення багат шарового зразка, який складається з нанесених на обертових пластинах кремнію (Fe 3 нм/Dy 2 нм)-мультисхарів свідчать, що перші шари, які осідають на основу Si є структурованими і магнітними у порівнянні з іншими. Зображення, отримані за допомогою тривимірного атомного зондування, мультисхарів, нанесених на кристали Si (плоскі шари) показали дифузію інтерфейсів, а також наявність великої кількості заліза в Dy-шарах. Обмінний зв'язок між Fe і Dy шарами є негативним, що дає можливість сформувати нові

ферромагнітні структури, з новими властивостями, що можуть мати нове практичне застосування. (Д. Блаветт, Е. Кадель, А. Таміон).

В працях Василюка П.М., Гаврилюка В.П., Петрика М.Р., Шаблія О.М., експериментально і теоретично вивчались дифузійні ефекти в багатошарових тонких оксидних плівках  $Me-Al_2O_3-FeCr_2O_4$  та  $Me-FeCr_2O_4-Al_2O_3$ , які запропоновані для використання як ефективні термо- та корозійностійкі нанопокриття робочих вузлів обладнання, що працюють в високотемпературних та агресивних середовищах (рідке скло, виготовлення оптоволокна, базальтоволокна тощо), забезпечуючи економію матеріалів.

Основними висновками з цих робіт є те, що виявлені структурні зміни при агрегації шарів та зумовлені ними концентраційні перерозподіли цих компонент (Fe, Dy, Tb) зумовили отримання нових характеристик створених наноконкомпозитів. Проте вказаними авторами такі концентраційні профілі отримані за рахунок дороговартісних експериментальних досліджень та класичними і наближеними методами дифузійної теорії, які не дозволяють отримати якісні описи концентраційних розподілів в нанощарах.

Підвищення якості оцінки технологічних параметрів багатошарових наноплівочок вимагає наукового підходу, зокрема для визначення концентраційних розподілів дифундованих компонент в нанощарах. Для цього необхідне вдосконалення існуючих підходів до моделювання дифузійного перенесення.

Таким чином виникає актуальна наукова задача розроблення моделей процесів дифузійного перенесення і методів оцінювання технологічних параметрів багатошарових наноплівочок.

# РОЗДІЛ 1.

## ТЕНДЕНЦІЇ РОЗВИТКУ МАТЕМАТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ДИFUЗІЙНОГО ПЕРЕНЕСЕННЯ В БАГАТОШАРОВИХ СЕРЕДОВИЩАХ

У цьому розділі міститься аналітичний огляд стану справ та тенденцій розвитку математичного моделювання процесів дифузійного перенесення в багат шарових середовищах. Проаналізовано особливості крайових задач дифузійного переносу в тонких багат шарових магнітних середовищах та результати сучасних експериментальних досліджень в галузі створення багат шарових наноплівочок та нанокомпозитів різної фізичної природи. Встановлено актуальність наукової задачі розроблення методів та моделей процесів дифузійного перенесення для оцінювання технологічних параметрів багат шарових наноплівочок.

### **1.1. Аналіз результатів сучасних експериментальних нанофізичних досліджень в галузі створення багат шарових наноплівочок та нанокомпозитів**

Як показує ряд досліджень в галузі переносу в неоднорідних та багатоскладових мікропористих середовищах, зі змінними фізико-хімічними характеристиками характер переносу має чітко виражений неоднорідний характер вздовж основних напрямів переносу в силу як змінних фізико-хімічних характеристик вздовж напрямку переносу так і впливу нестационарностей (зміни швидкостей та градієнтів швидкостей) на інтерфейсних масообмінних поверхнях [166, 169, 188-192, 204].

Аналогічна картина спостерігається за результатами експериментів щодо досліджень дифузії в багат шарових магнітних Fe/Dy – наноплівках, які сформовані як мультикомпозитні середовища тонких шарів багат інтерфейсної взаємодії з різними дифузійно-магнетними характеристиками. (Результати отримані групою Фізики матеріалів в Університеті м. Руан (Франція)). Зокрема в [202] досліджувались термічно-



випаровувані (Fe 3 нм / Dy 2 нм) мультишари та намагніченість глибини профілю (Fe/Dy) мультишарів. Основу цих досліджень складала магнітна рідкоземельні/перехідні металічні багат шарові тонкі плівки, що можуть розглядатися як магніто-оптичні носії запису інформації. Кристалічний характер шарів, неоднорідність інтерфейсів є важливим для розуміння макроскопічних властивостей наночарів. Досліджено також вплив температури (320 К чи 600 К) на нанохімічні і магнітні властивості Fe/Dy наночарів з допомогою методу тривимірного атомного зондування. Зразки, виготовлені у вигляді наконечника з радіусом кривизни близько 40 нм, піддавались дії високої позитивної напруги (3-15 кВ). Дослідження атомним зондуванням проводилися на (Fe 3нм/Dy 2нм)-мультишарах, нанесених на вигнуті вольфрамові поверхні (W поверхні) та на плоских (Fe 3нм/Dy 2нм) мультишарах, нанесених на багат шарові (001) кремнієві основи. Основною проблемою було те, що осілі на наконечник шари були вигнутими, і тому вони можуть відрізнятися від плоских шарів, що потребує уточнення відповідних моделей дифузії з урахуванням конфігурації середовища. [202]

Мультишари були нанесені на основи (Si або W наконечники) шляхом термічного випаровування чистих елементів в надвисокому вакуумі камери з фоновим тиском близько  $8 \times 10^{-10}$  мбар і тиск осідання –  $5 \times 10^{-10}$  мбар. Швидкість осідання становила 0,01 нм/с для кожного елементу, а товщина знаходилася під контролем кварцевого монітора, розташованого близько до основи держателя. Температура основи послідовно фіксується на 320К і 600К. Мультишари осаджувались на (001) кремнієві основи, орієнтовані для магнітних вимірювань і на W наконечники для структурних і хімічних аналізів. Також були проведені попередні дослідження плоских багат шарових нанесень на кремнії.

Наконечники для експерименту були виготовлені в два етапи. Вольфрамовий дріт діаметром 0,1 мм був спочатку електрополірований з водним розчином NaOH, щоб отримати наконечник з радіусом кривизни близько 10 нм. Другий етап це „фарбування” вольфрамового наконечника польовим іонним мікроскопом (FIM), з використанням гелію в якості

зображувального газу. Наконечник випаровувався, поки його поверхня не стала чистою і квазі-напівсферичною. Радіус кривизни наконечника було приведений до 40 нм. Зразок був в кінцевому підсумку переданий в камеру для осадження наночарів. Під час передачі зразок знаходився в атмосфері менше 1 хв.

Зразки для магнітних вимірювань були виготовлені з тридцяти Fe/Dy бішарів, з товщинами 3 нм для Fe і 1,3 нм для Dy. Вони були покриті захисним шаром Cr (50 нм), щоб уникнути як окислення так і іонної імплантації. Зразки були хімічно досліджені за допомогою компенсуючої енергії томографічного атомного зондування (ECoTAP) при 80 K в надвисокому вакуумі  $8 \times 10^{-10}$  мбар. Фізичний експеримент проводився за допомогою томографічно-атомного зондування – TAP (Tomographic Atom Probe). Базовий принцип застосування такого виду досліджень полягає в використанні іонізації і випарювання атомів з поверхні при допомозі електричного поля: імпульс високої напруги, що прикладається до наконечника, випаровує атоми з поверхні, які в подальшому збираються на детекторі, який здійснює аналіз досліджуваної області. Поверхневі атоми контролювано випарюються полем, шляхом періодично повторюваних (з частотою  $\sim 1$  КГц) імпульсів високої напруги на додаток до постійної напруги (рис.1.1.).

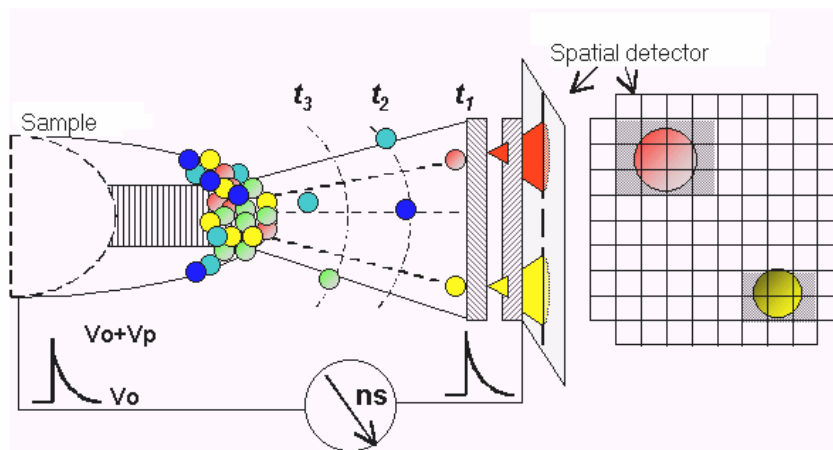


Рис. 1.1. Принцип дії томографічно-атомного зондування

Час біжучого спектрометру дозволяє зробити хімічне ототожнення випаруваних атомів з поверхні наконечника. Протягом процесу дослідження, з наконечника шар за шаром випарюються атоми і іонами, які збираються на

двосторонньому детекторі, що проводить аналіз досліджуваної області (15нм x 15нм).

В результаті експерименту були отримані петлі гістерезису, отримані при температурах (320 К і 600 К).

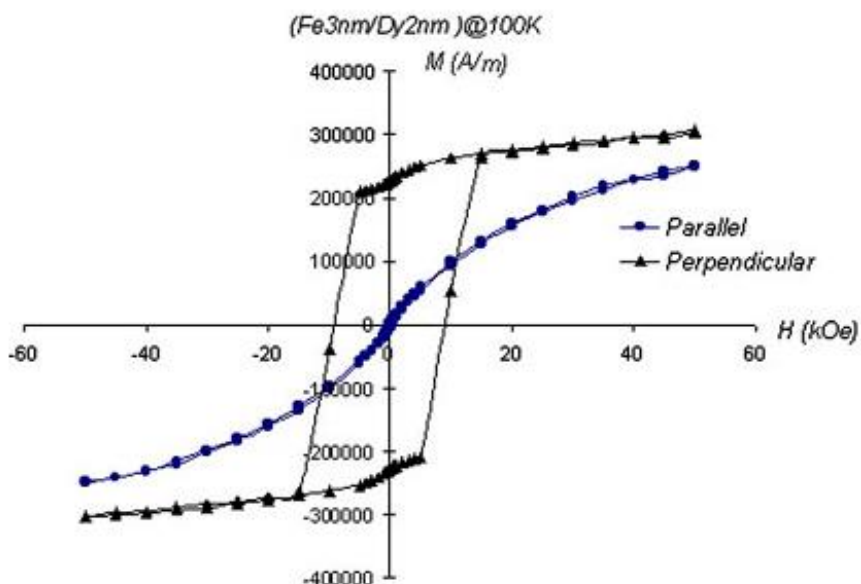


Рис. 1.2. Петлі гістерезису, отримані при температурах 320 К і 600К

Магнітна анізотропія зразка, зроблена при 320 К, не є ні плоскою, ні перпендикулярною до площини плівки. На відміну від неї є явною одновісна перпендикулярна магнітна анізотропія для мультишарів, депонованих при температурі 600 К.

Глибина профілів, отримана шляхом атомного зондування для аналізу мультишарів на W-вершинах представлені на рис. 1.3.

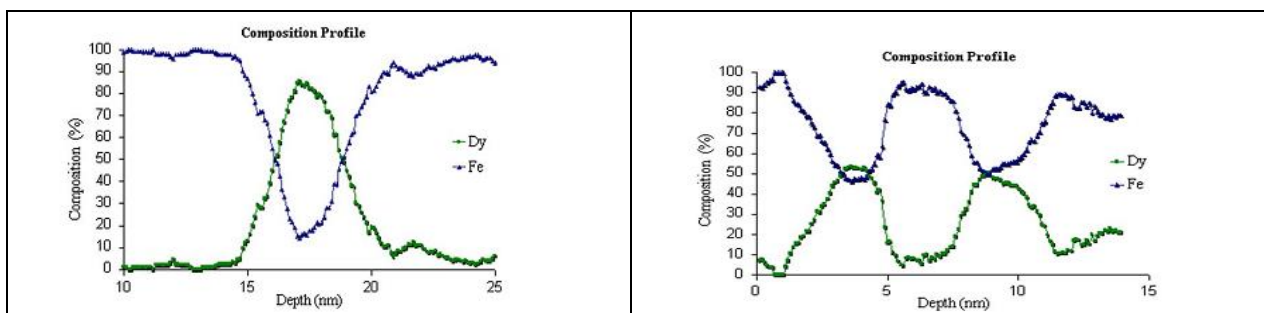


Рис. 1.3. Глибина профілів, отримані при температурах 320 К і 600К

Як видно з рис 1.3, існує набагато більше змішування Fe і Dy при 600 K в порівнянні з шарами, отриманими при 320 K.

Результати атомного зондування в поєднанні з магнітними вимірюваннями показують, що перпендикулярна магнітна анізотропія є більшою для мультишарів, в яких інтерфейси змішані. Найбільш важливим результатом є те, що основний внесок в перпендикулярну магнітну анізотропію в Fe/Dy мультишарах впливає з аморфного Fe сплаву Dy.

У той же час, подібне дослідження було розпочато на плоских основах, щоб позбутися ефекту кривизни. 3D-реконструкція аналізу обсягів плоских Fe/Dy мультишарів, нанесених на основи Si при 320 K (рис. 1.4) показує позиції Dy, Fe і Ga імпантованих атомів.

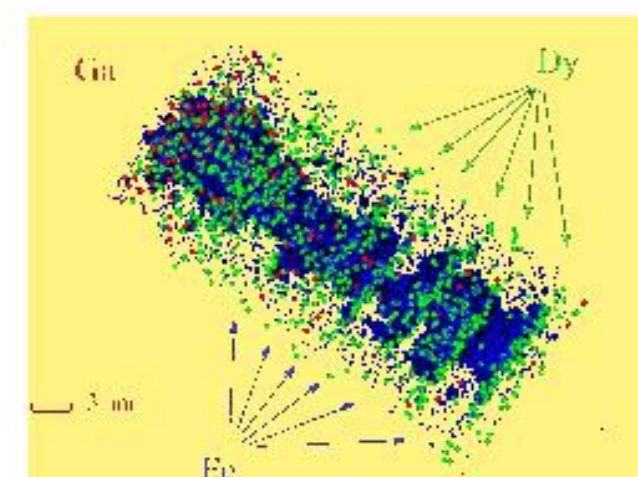


Рис. 1.4. 3D-реконструкція аналізу обсягів плоских Fe 3nm/Dy 1.5nm мультишарів

Відсутність хрому в реконструкції показує, що шар хрому був видалений під час FIB-фрезерування. Дев'ять Dy/Fe бішарів з 30 пройшли польові випаровування під час аналізу. Через руйнування зразка в процесі аналізу, тільки шість бішарів візуалізуються на рис. 1.4.

Ця 3DAP елементарна карта показує, що коли концентрація Ga падає до рівня фону, то багат шарова структура з'являється набагато більш чітко, порівняно з попередніми дослідженнями, але перемішування зберігається (в нижній частині реконструкції). Навіть у частині, де опромінення і пошкодження, як вважають, не відбувається (останні два бішари), дуже

змішаних інтерфейсів не спостерігається. Вважається, що це не викликано Ga-опроміненням, як було зазначено в 3DAP аналізі шарів, нанесених на W наконечник. Це може відбуватися як в результаті взаємодифузії, так і імплантацією в процесі напилення. Слід зазначити, що багато заліза (~65 %) спостерігається в Dy-шарах, тоді як менше 10% Dy виявлено в Fe-шарах. [200]

З розглянутого можна зробити висновок. Були досліджені (Fe 3 нм/Dy 2 нм) наночастиці осідання при температурі 320K і 600K надпровідними квантовими пристроями магнітометрії. [202] Був проведений тривимірний атомний масштабний аналіз плоских Fe/Dy мультишарів, нанесених на кристали Si. Показано, що Ga-опромінення призводить до змішування між Fe і Dy шарами, які знаходяться в пошкодженій зоні. Виявлено, що шари, які знаходяться ближче до основи, де майже немає іонів Ga, збереглися. 3DAP зображення мультишарів, нанесених на обидва кристали Si (плоскі шари) і вольфраміві наконечники (криві шари) показали дифузійні інтерфейси та наявність великої кількості заліза в Dy-шарах. [201]

Проаналізуємо експериментальні і чисельні дослідження, що стосуються намагніченості глибини профілю (Fe/Dy) мультишарів, які були зроблені у лабораторіях Руанського університету французькими вченими А. Таміоном, Ф. Оттом, П.-Е. Берком, Е. Талботом, К. Бордел, Д. Блаватом. [200]. Зразки були термічно випарені при надвисокому вакуумі при двох різних температурах осідання: 320K і 570K. та вивчалися рентгенівським відображенням (XRR), електронним мікроскопом високої роздільної здатності (HRTEM), конверсійними електронами Мосбауерівської спектрометрії (CEMS), SQUID магнітометрії та поляризованого відбиття нейтронів (PNR). Намагніченість профілів була отримана методом Монте-Карло при підтримці PNR відповідно. Ключова роль кристалічної структури підкреслюється магнітними вимірами глибини профілю, яка здійснюється за допомогою поляризованих нейтронів рефлектометрії. Метою даного експерименту було вивчення впливу температури осідання на магнітні властивості, особливо профілю намагніченості глибини (Fe/Dy) мультишарів. Сам експеримент полягав в

наступному. Багатошарові осідання (Fe 3нм/Dy 2 нм), мультишарів наносилися методом термічного випаровування в надвисокому вакуумі на обертових пластинах кремнію. Швидкість осідання становила близько 0,01 нм/с і товщини контролювалися кварцовим монітором. Фоновий тиск був  $10^{-8}$  Па, верхній шар був покритий Cr (5 нм), щоб запобігти окисленню. Температура основи ( $T_s$ ) послідовно фіксується на 320К і 570К. Типовий зразок складається з 30 бішарів для дослідження за допомогою електронної Мосбауерівської спектрометрії (CEMS), SQUID магнітометрії та електронним мікроскопом з високою роздільною здатністю (HRTEM). Для рентгенівського відображення (XRR) і PNR, зразки з 10 бішарів були підготовлені, щоб переконатися, що товщини і шорсткості були однаковими для всіх бішарів. Структуру шарів досліджували методом просвічуваної електронної мікроскопії (TEM).

Розглянемо хімічні та структурні характеристики. Перед PNR-експериментами, зразки характеризувалися за допомогою XRR, щоб знати, періодичність мультишарів. Рис. 1.6 показує криві XRR-мультишарів, отриманих при 320К і 570К.

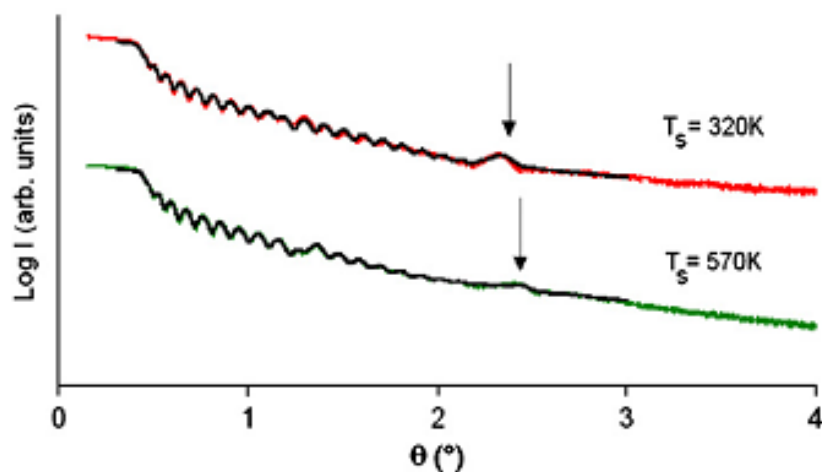


Рис. 1.6. Криві XRR-мультишарів, отриманих при 320К і 570К

Перетворення електронної Мосбауерівської спектрометрії Fe було використане для отримання структурної інформації про  $^{57}\text{Fe}$ -атоми мультишарів. Зразки були охарактеризовані в нульовому прикладеному полі

при кімнатній температурі, при нормальному падінні, з саморобним гелій-метан-пропорційним лічильником, з  $^{57}\text{Co}$  в Rh матриці (джерело). Експериментальні спектри були опрацьовані технологіями найменших квадратів з використанням методу гістограм. Мосбауерський спектр при 300К (Fe 3 нм/Dy 2 нм), мультишарів, депонованих при 320К і 570К наведені на рис. 1.7 (а) і (б).

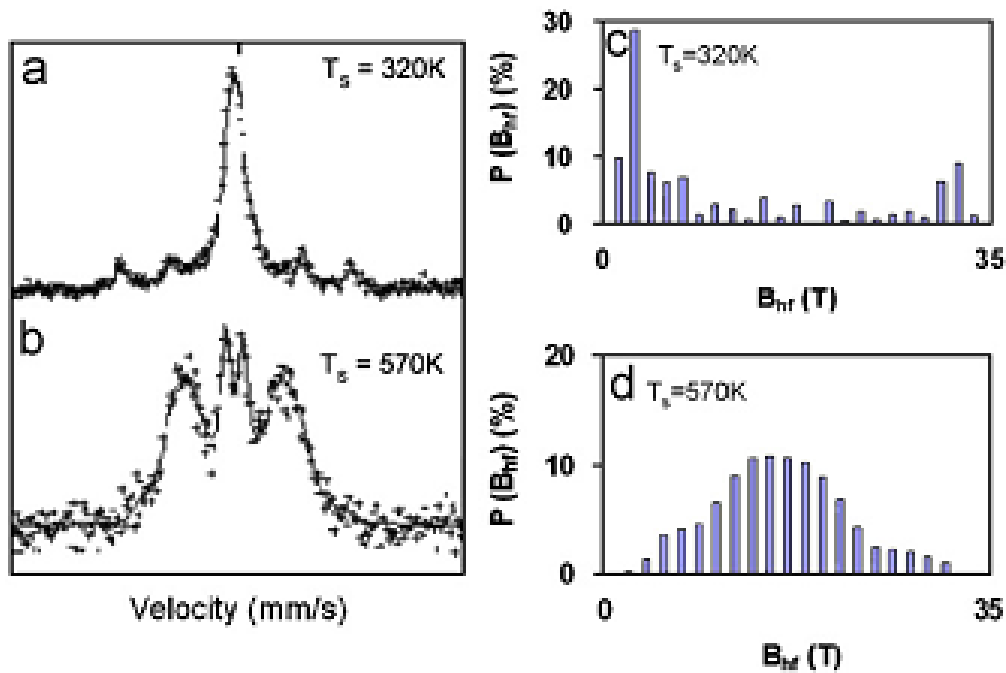


Рис. 1.7. Мосбауерський спектр мультишарів, депонованих при 320К і 570К

Для зразка, приготовленого при 320К, Мосбауерський спектр має невеликий секстет характеристик кристалічної структури заліза та інтенсивного центрального піка, що пов'язано з аморфністю Fe [203]. Для  $T_s = 570\text{K}$ , спектр характеризується неупорядкованою легованою структурою, як уже зазначалося в інших аморфних Fe-RE сплавах. Цей результат узгоджується з ТАР аналізом і кривою ХRR. (рис. 1.6), що ілюструє проникнення в Dy шари атомів Fe (температура 570К). Мультишари, головним чином структурно неупорядковані, але, згідно з СЕМС аналізами, нанокристали Fe дійсно існують, принаймні для  $T_s = 320\text{K}$ .

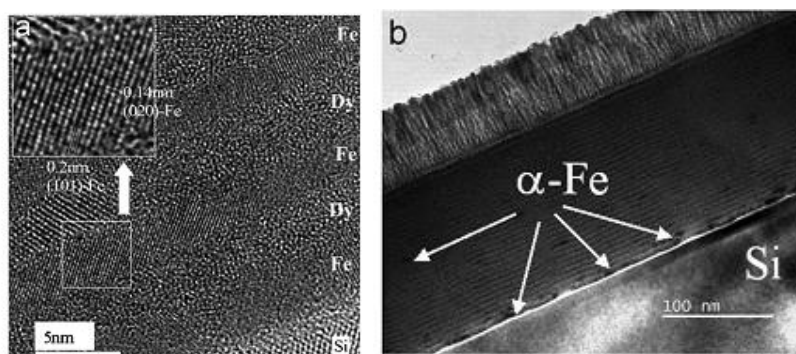


Рис.1.8. HRTEM і TEM-зображення (Fe 3 нм/Dy 2 нм) мультишарів депонованих при 320 і 570 К.

Шарувата структура зразків спостерігалася безпосередньо за допомогою HRTEM. Рис.1.8 показує HRTEM і TEM-зображення (Fe 3нм/Dy 2нм) мультишарів депонованих при 320К і 570К.

Аналогічні зображення були отримані для них обох [199]. Як можна спостерігати на збільшених зображеннях (рис. 1.8 (б)), ці зразки мають регулярну структуру. Темні шари відповідають Fe шарам і яскраві шари – Dy-шарам. Важливо також відзначити наявність темних плям у шарах заліза, переважно розташованих близько до основи Si. Ці плями приписуються дифракційному контрасту найближчих з нанокристалічних кластерів в шарах Fe. На зображення з високою роздільною здатністю (рис. 1.8 (а)), ми бачимо, що першим осілим Fe-шарам характерний полікристалічний, а не структурний порядок, що візуалізується в Dy- шарах.

В [200] встановлено, що кластери кристалів Fe, як виявило SEMS, головним чином розташовані близько основи кремнію. Рис. 1.9 показує електронну дифракцію подібних мультишарів.



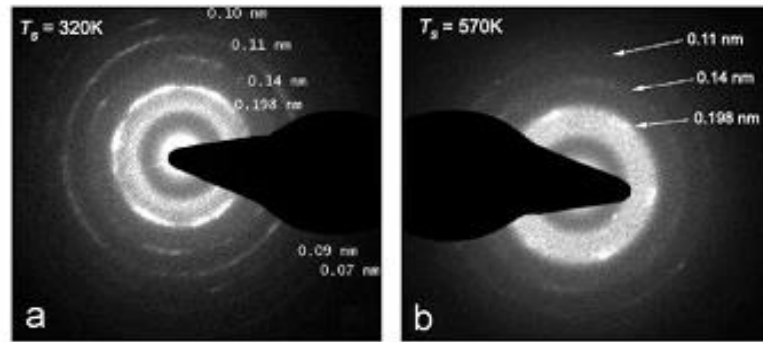


Рис.1.9. Електронна дифракція (Fe 3нм/Dy2 нм) мультишарів депонованих при 320 і 570К.

Широкі кільця дифракції спостерігаються на рис. 1.9 (а) і (б), що показує, що Dy і Fe шари досить аморфні. [197].

В [202] (Fe 3нм/Dy 2нм)-мультишари, отримані при 320К і 570К досліджувались поляризованою рефлектометриєю нейтронів (PNR) для того, щоб отримати глибину їх профілю намагніченості в багатошарових структурах. Були проведені експерименти на 10 (Fe 3 нм/Dy 2 нм) мультишарах на PRISM рефлектометрі з поляризованими нейтронами і поляризаційним аналізом. Знаки «+» чи «-» показують чи напрям спіна нейтрону є паралельним чи перпендикулярним до прикладеного поля Н. Поляризація пучка склала 97,5%, забезпечуючи дуже гарну якість при «++» «--» вимірюванні перерізу. [201].

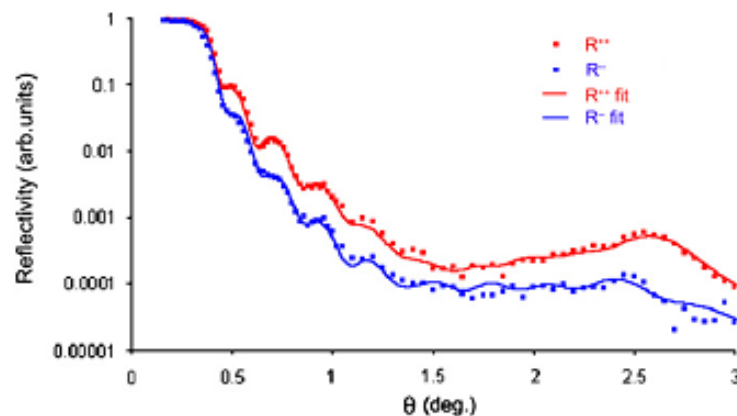


Рис. 1.10.  $R^{++}$  і  $R^{-}$  криві нейтронних відображень для мультишарів, депонованих при 320К і виміряних при 300К.

Рис. 1.10 показує  $R^{++}$  і  $R^{-}$  криві нейтронних відображень для мультишарів, закладених при 320К, отримані при 300К. Випробування проводилися з програмним забезпеченням SimulReflec, враховуючи, що стек з 10 (Fe/Dy) бішарів з постійною товщиною кожного узгоджується з XRR вимірюваннями. Для того щоб ввести додатковий ступінь свободи, намагніченість перших двох бішарів була відпущена вільно варіювати з HRTEM зображенням (рис. 1.9 (b)) припустивши, що ці шари структурно відрізняються від інших бішарів. При цьому ступені свободи було отримане наближення, забезпечуючи як і очікувалося антиферромагнітний зв'язок між намагніченостями Fe і Dy [198]. Отримані дані узгоджуються з відомими експериментальними даними. На рис. 1.12 [204] представлені намагніченості профілю зразка, яка вимірюється при 300К. В площині намагніченості ( $\mu_{//}$ ) виражаються в ( $\mu_B$  /atom). Невизначеність, за оцінками, є близькою до 0,2 ( $\mu_B$  /atom) [204].

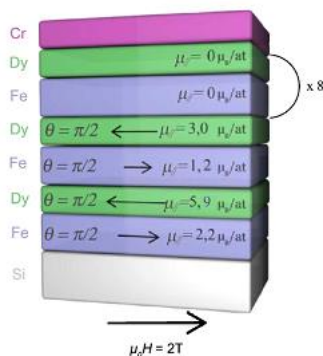


Рис. 1.12. Намагніченості профілю мультишарів, депонованих при 320 К і виміряних при 300 К.

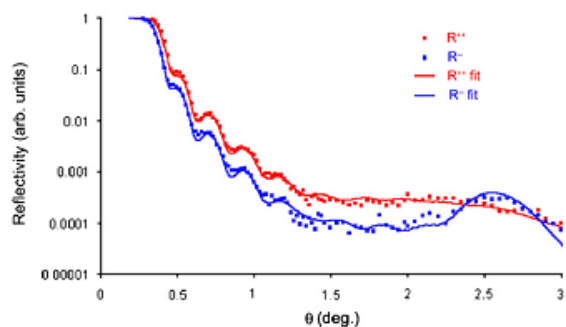


Рис. 1.13.  $R^{++}$  та  $R^{-}$  криві відображення нейтронів мультишарів, депонованих при 320 К і виміряних при 100 К.

Важливо зазначити, що сумарна намагніченість, що виводиться з PNR ( $0,6 \cdot 10^5$  А/м) узгоджується з експериментальним значенням, отриманим SQUID -магнетометрією біля 2 Т ( $0,7 \cdot 10^5$  А/м). Чорні стрілки представляють напрями повної намагніченості кожного шару і  $\theta$  – кут, утвореного між  $\mu$  і нормаллю до площини зразка (n). Намагніченість мультишарів не є повністю

однорідною. Тільки перші два бішари, нанесених на основу Si є магнітовпорядкованими, на відміну від інших шарів. Цей результат узгоджується з HRTEM аналізом і показує, що перші шари Fe, що осідають на основу, в основному кристалізується [166]. Встановлено, що непаралельна конфігурація Fe і Dy- намагніченості призводить до штучної феромагнетики. Цей негативний зв'язок, передбачений теорією Кемпбелла на атомному рівні, тут проявляється на нанометровому.

В [202] виявлено, що відсутність намагнічування заліза у верхніх шарах пояснюється зміною структури Fe шарів, яка стає аморфною, як це спостерігається в Мосбауерівській спектроскопії (рис. 1.6.). Температура Кюрі чистого аморфного Fe є, за оцінками, від 200 до 270К. В результаті експерименту виявлена також намагніченість Dy шарів, хоча чистий аморфний Dy повинен бути парамагнітним при кімнатній температурі ( $T_C = 110\text{K}$ )

Рис.1.13 показує криві відображення нейтронів мультишарів, закладених при 320 K і вимірюваних при 100 K. Ядерні довжини розсіювання Fe і Dy такі ж, як при 300 K. Мультишари є магнітно частково неоднорідні (рис. 1.14) через наявність  $\alpha$ -Fe нанокристалів в першому шарі Fe (рис. 1.7 (a), 1.8 (a) і 1.9 (a)). Намагніченість першозакладених Dy шарів близьке до отриманого при 300К, як це буде пояснено методом Монте-Карло. Для верхніх шарів, у площині намагніченості шарів заліза 0 ( $\mu_B$  /atom). можуть бути витлумачені існування РМА або утворенням «крученої» фази, як уже бачили в (Fe/Gd) мультишарах [162, 166]. При 100К, аморфний Fe є магнітовпорядкованим. Однак, мала товщина шару і відсутність спін-фліп сигналу несумісні з існуванням гелікоїдальної фази. Виявлено, що верхні шари Fe перпендикулярно намагнічені.

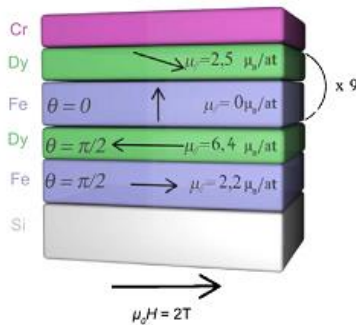


Рис. 1.14. Намагніченість профілю мультишарів, депонованих при 320 К і виміряних при 100 К

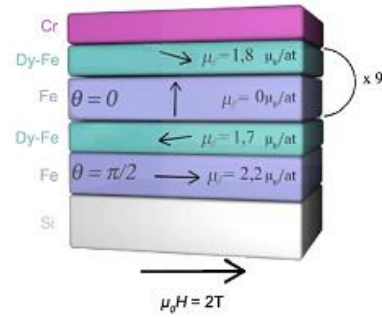


Рис. 1.15. Намагніченість профілю мультишарів, депонованих при 570 К і виміряних при 300 К.

В [204] здійснено аналіз зразків при 300 К і 100 К в площині поля 2 Т. Ядерна довжина розсіювання Fe така ж, як в натуральному Fe, в той час як ядерна SLD-характеристика щодо Dy є між Fe і Dy масами ядерних довжин розсіювання. Мультишари підготовлені при 570К складаються з послідовності Fe і Fe-Dy шарів сплаву. Отримані з PNR криві, для  $T_s = 570$  К схожі на попередні (рис 1.15). Показана глибина намагніченості профілів, що виводиться з PNR. При 300 К, як уже зазначалося для  $T_s = 320$  К, перший осілий шар Fe на основу Si є магнітовпорядкованим (рис. 1.15), що узгоджується з HRTEM результатами (рис. 1.8).

На рис. 1.15 показані також деякі кристалізовані кластери у Fe шарах, переважно розташованих у районі основи. Верхні шари Fe, структурно невпорядковані, не проявляються у площині магнітного вкладу відповідно до PNR. Однак, як видно з аналізу CEMS (рис. 1.7 (b), (d)) не існує значного парамагнітного сигналу. Отже, можна зробити висновок, що ці Fe-шари є феромагнітними і що їх намагнічування перпендикулярна площині зразка.

Для зразка, приготовленого при 320 К, верхні шари Fe були оточені немагнітними шарами Dy при 300 К, в той час як при  $T_s = 570$  К, Fe-шари оточені частково магнітовпорядкованими Fe-Dy шарами. Для  $T_s = 570$  К, феромагнетизм верхніх шарів Fe при 300 К, є, результатом ефекту поляризації за рахунок сусідніх феромагнітних шарів [201]. Встановлено, що аморфність Fe-Dy шарів сплаву є магнітно однорідною, тому що в площині намагніченість

першого шару є майже такою ж, як і у верхніх шарах. Як і в попередньо розглянутих експериментах, зв'язок між першим магнітним шаром Fe і першим шаром Dy негативний. Нарешті, знак Dy-Fe верхнього шару в площині є протилежним до знаку першого Dy-Fe шару, через взаємодію Зеемана.

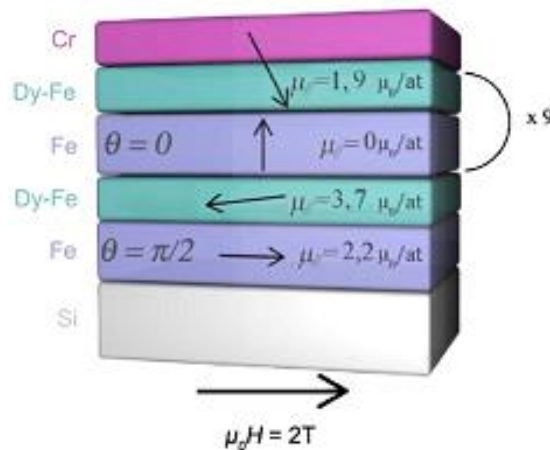


Рис. 1.16. Намагніченість мультишарів, сформованих при 570К і виміряних при 100К.

При 100 К з рис. 1.16, впливає пояснення того, що перший шар Fe є такий же, як і попередній. Збільшення намагніченості в першому Dy-Fe шарі, в порівнянні з отриманою намагніченістю при 300К, відбувається через зниження температури, оскільки Dy і є магнітодомінуючим. Що стосується верхніх шарів Fe, у площині намагніченості  $0(\mu_B/\text{atom})$  є однозначне пояснення існування PMA, як показано на петлі гістерезису (рис. 1.10 (d)). Це явище є еквівалентним для Dy-Fe шарів, які також володіють сильним PMA. Малість в площині намагніченості вимірюється тільки за рахунок сильної взаємодії між зеемановськими Dy-магнітними моментами в площині прикладеного поля. Більше того, PNR дозволяє привести до повної намагніченості  $M \approx 2,6 \cdot 10^5 \text{ A/m}$  з урахуванням Fe і Dy об'ємної щільності. Цей результат добре узгоджується з намагніченістю, яка вимірюється за допомогою SQUID-магнітометрії близько 2Т (рис. 1.10 (d)), коли магнітне поле прикладене в площині півки.

Таким чином на основі проведеного аналізу описаних в літературі експериментів по формуванню наномультисарів можна зробити такі висновки:

1. Мультишари є магнітно не цілком однорідними. Відповідно до проаналізованих HRTEM результатів, перші шари, які осідають на основу Si є структурованими і магнітними у порівнянні з іншими.

2. Обмінний зв'язок між Fe і Dy шарами є негативним, що дає можливість сформувати нові феромагнітні структури, з новими властивостями, що можуть мати нове практичне застосування.

Додатковим підтвердженням цих висновків щодо гіпотези про отримання нових, означених вище феромагнітних структур, зокрема про намагніченість першонанесених шарів є також моделювання, проведене методом Монте-Карло на основі стандартного одиничного-фліп Метрополісного алгоритму. Було ще раз показано, що якщо система складається з (Fe/Dy/Fe) тришарів, то вона є феромагнітною. Так, були розглянуті два різних зразки: перший з них відповідає мультишару, який зберігається при 320 K, він характеризується різкою межею між Fe і Dy шарами, тоді як другий є представником мультишарів, які підготовлені при 570 K, тут демонструється велика дифузія атомів Fe в шарові Dy [197].

Вказані методи моделювання були спрямовані також на вивчення залежності профілю концентрації від намагніченості, індукованої в шарі Dy оточуючими шарами Fe. Товщини шарів були обрані близькі до експериментальних (3 нм для Fe і 2 нм для Dy) і приведені до загальної концентрації атомів Fe 80% в кожному випадку.

Результати чисельного моделювання методом Монте-Карло показано на рис 1.17 (a) [198].

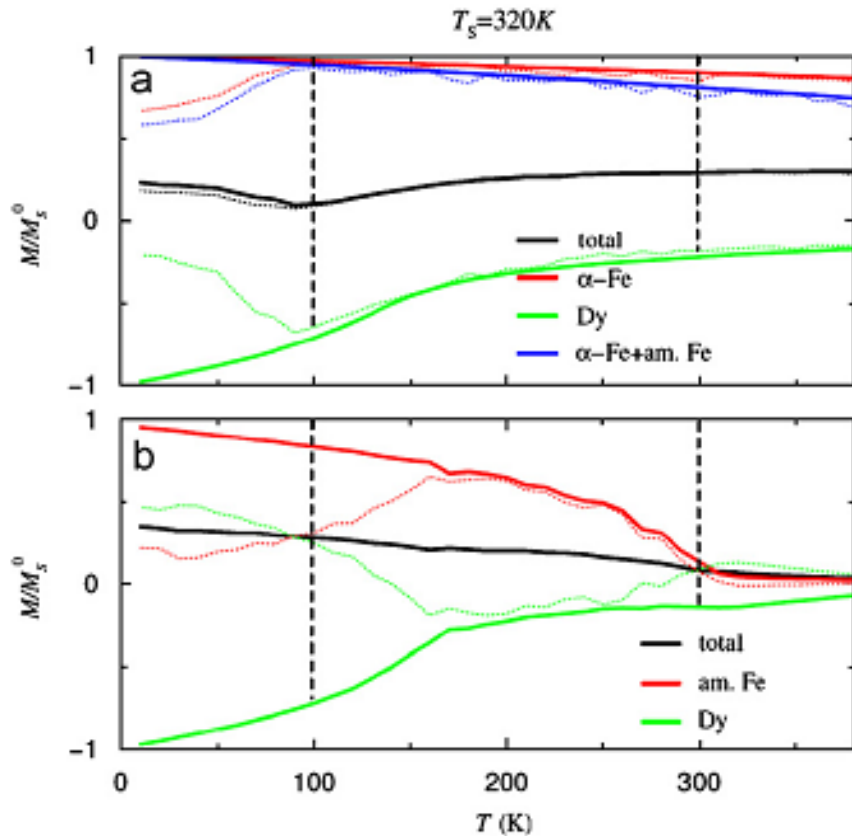


Рис. 1.17. Результати чисельного моделювання методом Монте-Карло.

Зокрема, теплові зміни намагніченості зразка А та трьох окремих шарів прогнозовано вздовж напрямку прикладеного магнітного поля. Значення намагніченості поділяються по насиченості намагніченості (повне або шар за шаром); отже, намагніченість змінює величину від -1 до +1 через негативну обмінну взаємодію між Fe і Dy.

При  $T = 300\text{K}$  можна спостерігати, що Fe-шари були сильно намагнічені, трохи більше, для кристалічної фази (рівень 1), ніж для шару, що містить як аморфний так і кристалічний Fe (рівень 3). Це пов'язано зі значенням обмінної взаємодії, яке більше в  $\alpha\text{-Fe}$ , ніж в аморфному Fe. Хоча критична температура чистого аморфного Dy становить близько 110K, відзначимо, що ефект близькості з Fe шарами призводить до залишкової намагніченості  $0,2 M_S \sim 2 \mu\text{V/at}$ . Ці результати підтверджують якість PNR підходу, який показує ненульову намагніченість перших двох шарів Dy при кімнатній температурі. При зниженні температури шари Dy поступово впорядковуються, що

призводить до зниження регресій чистої намагніченості. При  $T = 100$  К, трохи вище температури магнітного компенсації, Ду-шари досить сильно намагнічуються вздовж прикладеного поля, ( $M_H \sim 0,65 M_S$ ), яка дає магнітний момент на атом  $6,5\mu_B$ , як це спостерігалось в PNR-вимірюваннях.

Вказана методика моделювання методом монте-Карло дала можливість підсумувати магнітне впорядкування зразка, а також екстраполювати магнітну конфігурацію при низькій температурі ( $T = 10$  К).

Нижче 100 К можна спостерігати самостійне впорядкування Ду-шарів вздовж невизначеного напрямку між зеемановською енергією з Fe і Ду магнітними моментами і міжфазної енергії обміну Така орієнтація намагніченості при низьких температурах в напрямку, який є необов'язковим, в магнітному полі, може бути пояснена розрахунком енергії з урахуванням середньої обмінної взаємодії між найближчими сусідніми атомами [199]. Припустивши, що феромагнітний порядок є в кожному шарі і визначається як кут  $\alpha$  між напрямками Ду-моментів і прикладеного магнітного поля і кута  $\beta$  між Ду і Fe-моментами (рис. 1.20 (a)), можна також визначити, з допомогою цієї методики, енергію тришарів як функції від параметрів  $\alpha$  і  $\beta$  [198].

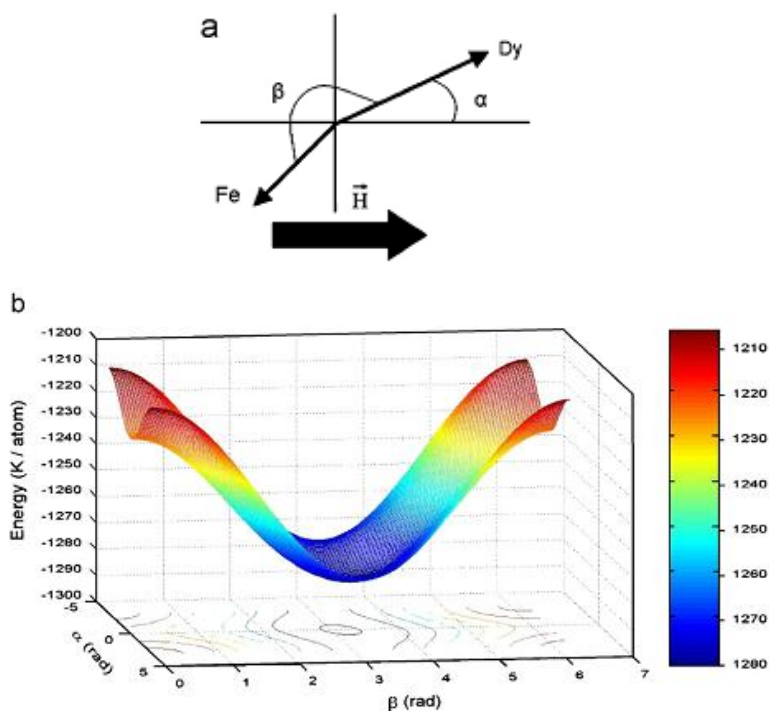


Рис. 1.18. а) визначення кутів б) зміна енергії як функції, що залежить від кутів



Результати, показані на рис. 1.18 (b), демонструють що мінімум, як і очікувалося, відповідає  $\alpha=0$  і  $\beta=\pi$ , а це означає, що існує феромагнітна послідовність вздовж напрямку прикладеного магнітного поля. Цей мінімум є плоским уздовж  $\alpha$ -осі. Зміни параметра  $\alpha$  від 0 до 1 рад призводить до невеликої зміни енергії  $E$  ( $\alpha=1, \beta=0$ )- $E \cong 13\text{K/at}$ .

Вказаний результат моделювання показує, що при низькій температурі, напрям намагніченості не може бути точно відомий, тому що навіть невеликі теплові флуктуації досить сильні, щоб викликати збурення в намагнічування.

В [199] проведено аналіз інших мультишарів, які здані на зберігання при 570 K, тут структурні відмінності походять від дифузії Fe-атомів в Dy-шари.

Середній магнітний момент на атом у другому шарі складає  $0,7 \times 10^{-0,3} \times 2,2 \sim 6,3 \mu\text{в}$ , а не 10  $\mu\text{в}$ , як це було для зразка А.

При 100 K, навіть якщо Dy-Fe шар як і раніше є сильно замагніченим, компоненти намагніченості вздовж прикладеного поля зменшується приблизно до 2,2  $\mu\text{в}$ . При низькій температурі, напрямок магнітних моментів є інтерферентним і залежить від конкуренції в зеемановській взаємодії між Fe і Dy-підгратками [201]. Однак слід зазначити, що ми не можемо, з цієї простої моделі, довести існування РМА, так як ми не включали будь-якої магнітної анізотропії в гамільтоніан.

Отже, як підтверджують проведені нанофізичні дослідження, із застосуванням поляризованої нейтронної рефлектометрії до мультишарів (Fe/Dy), можливо визначити глибину магнітного профілю в (Fe/Dy) мультишарах, збережених в різних умовах випаровування. Це також дало змогу встановити феромагнітний порядок зразків на основі перпендикулярної магнітної анізотропії, яка була знайдена при кімнатній температурі для мультишарів, які депоновані при 570 K.

Поряд з магнітними, на сучасному етапі розвитку технологій також активно досліджуються оксидні плівки. Зокрема, в працях Василюка П.М., Гаврилюка В.П. [21-23] експериментально вивчались дифузійні ефекти в багат шарових тонких оксидних плівках Me-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-FeCr<sub>2</sub>O<sub>4</sub> та Me-FeCr<sub>2</sub>O<sub>4</sub>-

Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, які запропоновані для використання як ефективні термо- та корозійностійкі нанопокриття робочих вузлів обладнання, що працюють у високотемпературних та агресивних середовищах (рідке скло, виготовлення оптоволокна, базальтоволокна тощо), забезпечуючи економію матеріалів. Сплави системи залізо-хром використовують як конструкційний матеріал в атомній енергетиці, при виробництві мінеральних волокон. У напівпровідниковій техніці застосовуються багатошарові оксиди, хімічний склад яких визначається такими компонентами, як Cr, Al, Si, PЗМ. Було встановлено, що утворення на поверхні багатошарових оксидів забезпечує високу жаростійкість в інтервалі 1000°-1300°С. Серед інших інтерес викликають сплави (мас. %) Fe-35Cr-(0,5;3) Al. При вмісті 0.5% Al на поверхні сплаву утворюються оксиди за схемою Me-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-FeCrO. Якщо вміст Al підвищений до 3%, то оксиди розташовуються за такою схемою: Me-FeCrO-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. При цьому різко зростає жаростійкість сплаву, оскільки утворення зовнішніх оксидів алюмінію перешкоджає проникненню кисню у внутрішні шари. Загальна товщина окалини при цьому зменшується у 3-4 рази. Визначення дифузійних характеристик дозволяє скоригувати хімічний склад сплавів і прогнозувати ресурс їх роботи.

Задачі вивчення дифузії в багатошарових плівках вимагають розробки нових методів моделювання і математичних моделей для опису явищ, які враховують наявність переходів (інтерфейсів) між суміжними шарами. Ефективними методами, які найповніше враховують проаналізовані вище особливості, є методи інтегральних перетворень Фур'є, Лапласа, Фур'є-Бесселя, Вебера, Ганкеля, Конторовича-Лебедева, з використанням яких можна розв'язати різні типи краєвих задач математичної фізики однорідних структур, у тому числі задачі дифузії для різних середовищ та змодельовати їх для реалізації на ПК

## **1.2. Особливості крайових задач дифузійного переносу в тонких багат шарових магнітних середовищах**

Розвиток сучасних нанотехнологій та створення новітніх наноструктур і матеріалів ставить нові завдання до дослідження механізмів кінетики та інтенсифікації дифузійного переносу в багат шарових неоднорідних середовищах різної конфігурації, що дозволяють описувати складні механізми системи інтерфейсних взаємодій, умови рівноваги та нестационарні режими переносу на масообмінних поверхнях. Дослідження процесів дифузійного переносу в неоднорідних середовищах на сьогоднішній день вимагає розвитку нових якісних методів моделювання, що дозволяють описувати складні механізми системи інтерфейсних взаємодій між усіма складовими переносу та нестационарних режимів переносу на масообмінних поверхнях.

Проблеми математичного моделювання дифузійного переносу в однорідних і неоднорідних середовищах та методи побудови математичних розв'язків таких моделей були розглянуті в роботах А.В. Ликова [83-85], Я.С. Уфлянда [149], І.В. Сергієнка [127, 128], В.С. Дейнеки [41 – 43], В.В. Скопечького [142], І.М. Федоткіна [150], Fraissard, [186, 187], Blavette D., Cadel E. [166, 169, 200, 202] та ін. Для однорідних середовищ дифузійного переносу застосовувались методи інтегральних перетворень Фур'є, Лапласа, Вебера, Ганкеля і Гільберта. Для неоднорідних середовищ здебільшого застосовувались чисельні методи.

Методологія математичного формування фізико-технологічних процесів переносу у неоднорідних та багатоскладових дифузійних середовищах і дослідження ефективних числових методів, їх моделювання на ПК, у тому числі побудова методом скінченних елементів високоточних обчислюваних схем розрахунку полів розв'язків моделей розглянуті в працях Ляшка І.І. [82], Сергієнка І.В., Скопечького В.В., Дейнеки В.С. [41- 43, 128, 142].

Проблеми формування крайових задач дифузійного переносу в багатоскладових середовищах для різних технологічних застосувань розглядались в роботах Ликова А.В. [83-85], Бомби А.Я. [12, 13], Власюка А.П.

[30], Булавацького В.М. [18], Федоткіна І.М. [150], Петрика М.Р. [95-117], Е. Каделя [202], Ж. Фрезара [186, 187]. В цих роботах для математичного моделювання як стаціонарних так і нестаціонарних процесів дифузійного переносу поряд з чисельними методами також використовуються аналітичні та асимптотичні методи одержання розв'язків математичних моделей. Останні надають перевагу розробникам та аналізаторам технологічних процесів оперативно здійснювати якісний аналіз (як числових так і символічних) взаємодій різних кінетичних режимних та конструктивних параметрів та ефективні оцінки перебігу процесів тощо.

В наведених роботах в якості методології моделювання цих процесів переносу використовувались методи теорії крайових задач, методи інтегральних перетворень Фур'є, Лапласа, Бесселя. При використанні вдалих схем формалізації умов рівноваги, ці методи є ефективним інструментом моделювання, що забезпечують високий ступінь адекватних модельних розв'язків їх експериментальним аналогам, забезпечують швидку збіжність обчислювальних процедур, збіжність розв'язків до початкових та крайових умов, дають можливість враховувати взаємодії широкого класу важливих фізичних та технологічних чинників.

Як показує цілий ряд досліджень в галузі переносу в неоднорідних та багатоскладових мікропористих середовищах, зі змінними фізико-хімічними характеристиками, характер переносу має чітко виражений неоднорідний характер вздовж основних напрямів переносу в силу як змінних фізико-хімічних характеристик вздовж напрямку переносу так і впливу нестаціонарностей (зміни швидкостей та градієнтів швидкостей) на інтерфейсних масообмінних поверхнях [95-99, 115, 187-189, 198-202].

Аналогічна картина спостерігається на результатах експериментів досліджень дифузії в багатосферних магнітних Fe/Dy – наноплівках, які сформовані як мультикомпонентні середовища тонких шарів багатоінтерфейсної взаємодії з різними дифузійно-магнетними

характеристиками (рис. 1.3., 1.5.), отриманих групою Фізики матеріалів в Університеті м. Руан (Франція).

Означене вище визначає необхідність створення нового математичного апарату для моделювання таких систем переносу, у тому числі і нелінійних, в неоднорідних і нанопористих середовищах, розвиваючи і узагальнюючи певні класи методів теорії крайових задач, зокрема методи інтегральних перетворень Фур'є, Фур'є-Бесселя, Вебера, Ганкеля, Лапласа, операційного числення Хевісайда та методу впливу функцій Коші (фундаментальних матриць Коші) на складніші структури крайових умов та системи умов багатоінтерфейсної взаємодії з рахуванням нестационарності – швидкостей зміни градієнтів параметрів переносу на краях та масообмінних інтерфейсних поверхнях. Нестационарність масообміну може враховуватись при цьому через використання у крайових умовах і системі багатоінтерфейсних умов відповідних крайових задач переносу диференціальних операторів  $\frac{\partial}{\partial t}, \frac{\partial^2}{\partial t^2}, \frac{\partial^2}{\partial t \partial x}$  як спектрального параметру перетворення Лапласа.

Узагальнюючи основні типи крайових та інтерфейсних умов [64, 65, 181], дослідження розглядуваних моделей пропонується з використанням таких узагальнених крайових умов та систем багатоінтерфейсної взаємодії (n-інтерфейсних умов третього роду) між складовими тонкими шарами неоднорідних багатоінтерфейсних нанопористих середовищ (напрямок переносу  $z$ ):

$$\begin{aligned} & [(\alpha_{11}^0 + \delta_{11}^0 \frac{\partial^s}{\partial t^s}) \frac{\partial}{\partial z} + (\beta_{11}^0 + \gamma_{11}^0 \frac{\partial^s}{\partial t^s})] C_1(t, z) \Big|_{z=l_0} = \omega_0(t); \\ & [(\alpha_{22}^{n+1} + \delta_{22}^{n+1} \frac{\partial^s}{\partial t^s}) \frac{\partial}{\partial z} + (\beta_{22}^{n+1} + \gamma_{22}^{n+1} \frac{\partial^s}{\partial t^s})] C_{n+1}(t, z) \Big|_{z=l_{n+1}} = \omega_{n+1}(t) \end{aligned} \quad ; \quad (1.1)$$

$$\left[ [(\alpha_{j1}^k + \delta_{j1}^k \frac{\partial}{\partial t}) \frac{\partial}{\partial z} + (\beta_{j1}^k + \gamma_{j1}^k \frac{\partial^s}{\partial t^s})] C_k(t, z) - [(\alpha_{j2}^k + \delta_{j2}^k \frac{\partial^s}{\partial t^s}) \frac{\partial}{\partial z} + (\beta_{j2}^k + \gamma_{j2}^k \frac{\partial^s}{\partial t^s})] C_{k+1}(t, z) \right] \Big|_{z=l_k} = \omega_{kj}(t)$$

$k = \overline{1, n}; j = \overline{1, 2}.$

тут  $C_k$  – концентрації дифундованої компоненти для  $k$ -го шару неоднорідного багатоінтерфейсного нанопористого середовища,  $\alpha_{jm}^k, \beta_{jm}^k, \delta_{jm}^k, \gamma_{jm}^k$  - константи, що в узагальненому вигляді можуть описувати механізми багатоінтерфейсної системи взаємодій на масообмінних межах,  $\omega_0(t), \omega_{n+1}(t), \omega_{kj}(t)$  - вирази правих частин (1.1), що виражають інтенсивності масообмінних крайових та інтерфейсних взаємодій,  $j, m = \overline{1, 2}, k = \overline{1, n+1}; s = \{1, 2\}$ .

Як показують експериментальні дані сучасних експериментальних досліджень нанодифузії в багатошарових нанопористих середовищах (багатоінтерфейсні наносистеми тонких плівок та нанопористих мембран тощо), важливу роль при дослідженні загальної кінетики переносу відіграє врахування впливу швидкостей зміни градієнтів основних параметрів переносу (концентрацій, тисків у міжчастинковому просторі та порах частинок) на краях та системі інтерфейсних масообмінних поверхонь, спричинених зміною дифузійних та інших фізичних характеристик багатошарових середовищ [154, 175, 177].

Таким чином, врахування в моделях переносу в неоднорідних нанопористих середовищах вказаних вище чинників потребує розробки та застосування методів, що дозволяють отримувати і досліджувати розв'язки та ефективні процедури моделювання.

Найефективнішими методами, які найповніше враховують проаналізовані вище особливості є методи інтегральних перетворень Фур'є, Лапласа, Фур'є-Бесселя, Вебера, Ганкеля, Конторовича-Лебєдєва, які і сьогодні інтенсивно знаходять своє використання для розв'язування різних типів краєвих задач математичної фізики однорідних структур, у тому числі в задачах дифузії для різних середовищ та математичного моделювання на ПК [95-116]. Вперше такі інтегральні перетворення та методика їх застосування до розв'язування крайових задач як математичних моделей різних фізичних процесів, головно процесів теплопровідності та механіки, з'явилися у математичній літературі у 60-70 роках цього століття у працях Куранта Р. [58], Ликова А.В. [83, 85],

Уфлянда Я.С. [149]. Зокрема, у працях Уфлянда Я.С. було описане узагальнене інтегральне перетворення Фур'є на випадок декартової вісі (напівобмеженого середовища); декартового сегменту (напівобмеженого середовища); декартового сегменту з однією точкою спряження (двоскладового середовища). Побудовані також гібридні інтегральні перетворення Фур'є-Бесселя; Бесселя-Фур'є на двоскладовій осі за умови ідеального контакту. Методика цих робіт була запропонована в роботах В.С.Проценка [124] для побудови гібридних інтегральних перетворень типу Фур'є-Лежандра, Бесселя-Лежандра, Фур'є, Ганкеля за мінімальних умов на структуру диференціальних операторів Лежандра і Бесселя, а також умов спряження.

Математична теорія гібридних інтегральних перетворень отримала подальший розвиток у роботах Ленюка М.П. та його учнів. При найзагальніших припущеннях – на структури диференціальних операторів Бесселя, Лежандра, крайових умов та умов спряження побудовані інтегральні перетворення Фур'є-Бесселя і Вебера на полярній осі та на півосі з  $n$ -точками спряження, скінченні гібридні інтегральні перетворення, породжені різними можливими комбінаціями диференціальних операторів Фур'є, Бесселя, Лежандра на декартовій осі і декартовій півосі та полярній осі з однією і двома точками спряження. [61-70, 73-79, 91, 110-115].

В праці Ленюка М.П. і Петрика М.Р. [74] узагальнені означені вище інтегральні перетворення Фур'є, Фур'є-Бесселя, Вебера, Ганкеля (1-го; 2-го роду) на складні структури крайових умов та умов спряження, які використовуються для реальних процесів масообміну в неоднорідних середовищах з урахуванням нестационарних режимів переносу на інтерфейсних поверхнях: на крайових поверхнях та поверхнях контакту (спряження) з використанням спектрального параметру.

Особливістю математичних моделей крайових задач процесів адсорбційного переносу в дифузійних магнітних середовищах, що протікають у композитних середовищах як для однорідних так і для неоднорідних середовищ, є те, що вони по своїй фізичній природі є нерівноважними

процесами, протікають здебільшого в режимі нестационарного масообміну на поверхнях контакту середовищ. Наявність впливу зовнішніх градієнтів переносу різної природи та відмінність фізико-хімічних та дифузійних властивостей для суміжних тонких пластів середовищ переносу потребує додаткового врахування в моделях факторів багатоструктурності та багатоінтерфейсності, що визначає загальну картину переносу. Різноманітність кінетичних характеристик, розмірів шарів, молекул та різноманітність конфігурації дифузійних середовищ (плоска, циліндрична, сферична) вимагає нових підходів як до фізичної постановки задач так і для створення їх математичного опису з метою максимального врахування впливу чинників. Це також потребує розвинення означених вище методів інтегральних перетворень Фур'є, Бесселя, Ганкеля, методів побудови фундаментальних функцій Коші для одержання аналітичних розв'язків досліджуваних моделей та крайових задач, алгоритмізації обчислювального процесу та математичного моделювання цих процесів на ПК.



## РОЗДІЛ 2

### МЕТОДИ МАТЕМАТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ В ЗАДАЧАХ ДИФУЗІЙНОГО МАСОПЕРЕНОСУ З СПЕКТРАЛЬНИМ ПАРАМЕТРОМ В БАГАТОІНТЕРФЕЙСНИХ НЕОДНОРІДНИХ ЦИЛІНДРИЧНИХ СЕРЕДОВИЩАХ

#### 2.1. Скінченні інтегральні перетворення типу Ганкеля першого роду і другого роду для однорідних циліндричних середовищ переносу

##### 2.1.1. Скінченне інтегральне перетворення типу Ганкеля 1-го роду для однорідного обмеженого циліндричного середовища

Розглядається методологія побудови скінченного інтегрального перетворення типу Ганкеля 1-го роду для однорідного обмеженого циліндричного середовища  $I_0 = \{r : r \in (0, R), R < \infty\}$ , породженого диференціальним оператором оператором Бесселя

$$B_{\nu\alpha} = \frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r}(2\alpha + 1)\frac{d}{dr} - (\nu^2 - \alpha^2)r^{-2}, \nu \geq \alpha \geq \frac{1}{2}$$
 і крайовим диференціальним

оператором  $\mathcal{L}_{11}^m = \left( \alpha_{11}^1 + \delta_{11}^1 \frac{\partial^m}{\partial t^m} \right) \frac{\partial}{\partial r} + \beta_{11}^1 + \gamma_{11}^1 \frac{\partial^m}{\partial t^m}, m = \overline{1, 2}, |\alpha_{11}^1| + |\beta_{11}^1| \neq 0$ , що врахує

швидкості зміни градієнтів основних параметрів переносу на крайовій поверхні  $r = R$ . Побудова означених інтегральних перетворень для часткового випадку  $\delta_{11}^1 = \gamma_{11}^1 \equiv 0$  розглянуто в праці [122]. Наявність похідної по  $t$  в крайовому операторі  $\mathcal{L}_{11}^m, m = \overline{1, 2}$  приводить до появи спектрального параметра в крайовій умові відповідної сингулярної спектральної задачі Штурма-Ліувілля.

Означене скінченне інтегральне перетворення Ганкеля 1-го роду будуватимемо з використанням ядра Коші – фундаментальний розв'язок задачі Коші для  $B$ -параболічного рівняння масопереносу при однорідній крайовій умові. Отже, розглянемо задачу побудови обмеженого в області

$D^+ = \{(t, r) : t \in (0, \infty), r \in (0, R)\}$  розв'язку рівняння масопереносу  $B$ -параболічного типу [151] для однорідного циліндричного середовища із нестационарним режимом масообміну на крайовій поверхні

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \gamma^2 u - D \cdot B_{v,\alpha} [u] = 0, \gamma^2 \geq 0, D > 0 \quad (2.1)$$

за початковою умовою

$$u(t, r) \Big|_{t=0} = g(r) \quad (2.2)$$

та крайовими умовами

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial r} (r^{\alpha-v} u) = 0, L_{11}^1 [u] \Big|_{r=R} = 0. \quad (2.3)$$

Припустимо, що функція  $u(t, r)$  є оригіналом за Лапласом щодо  $t$  [108]. У зображенні за Лапласом отримуємо крайову задачу: побудувати обмежений на  $I_0$  розв'язок рівняння Бесселя для модифікованих функцій

$$(B_{v,\alpha} - q^2) u^*(p, r) = -\bar{g}(r), \quad q^2 = a^{-2}(p + \gamma^2), \quad \bar{g} = a^{-2} g(r) \quad (2.4)$$

за крайовими умовами

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{d}{dr} [r^{v-\alpha} u^*(p, r)] = 0; \quad \left( \bar{\alpha}_{11}^1 \frac{d}{dr} + \bar{\beta}_{11}^1 \right) u^* \Big|_{r=R} = \delta_{11}^1 g'(R) + \gamma_{11}^1 g(R). \quad (2.5)$$

Тут  $\bar{\alpha}_{11}^1 = \alpha_{11}^1 + \delta_{11}^1 p, \bar{\beta}_{11}^1 = \beta_{11}^1 + \gamma_{11}^1 p$ .

Зафіксуємо вітку  $q = D^{-1/2}(p + \gamma^2)^{1/2}$ , на якій  $\Re eq > 0$ . Фундаментальну систему розв'язків для рівняння  $(B_{v,\alpha} - q^2)v = 0$  утворюють функції Бесселя  $I_{v,\alpha}(qr)$  та  $K_{v,\alpha}(qr)$  [41]. Безпосередньо перевіряється, що єдиним розв'язком крайової задачі (2.4), (2.5) є функція

$$u^*(p, r) = \int_0^R H_{v,\alpha}^*(p, r, \rho) \bar{g}(\rho) \rho^{2\alpha+1} d\rho. \quad (2.6)$$

Тут бере участь функція Коші

$$H_{v,\alpha}^*(p, r, \rho) = \frac{q^{2\alpha}}{U_{v,\alpha;11}^{11}(qR)} \begin{cases} I_{v,\alpha}(qr) \Psi_{v,\alpha;11}^{1*}(qR, q\rho), & 0 < r < \rho < R \\ I_{v,\alpha}(q\rho) \Psi_{v,\alpha;11}^{1*}(qR, qr), & 0 < \rho < r < R \end{cases} \quad (2.7)$$

Вважається, що  $\delta_{11}^1 g'(R) + \gamma_{11}^1 g(R) = 0, \alpha_{11}^1 \gamma_{11}^1 - \beta_{11}^1 \delta_{11}^1 \neq 0$ . Повертаючись в рівності (2.6) до оригіналу, одержуємо єдиний розв'язок задачі (2.1) – (2.3):

$$u(t, r) = \int_0^R H_{v,\alpha}(t, r, \rho) g(\rho) \rho^{2\alpha+1} \sigma d\rho, \quad \sigma = a^{-2}. \quad (2.8)$$

За означенням Лаплас-оригінал  $H_{v,\alpha}^*(p,r,\rho)$  знаходиться за формулою

$$\text{обернення [149, 295]} \quad H_{v,\alpha}(t,r,\rho) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma_0-i\infty}^{\sigma_0+i\infty} H_{v,\alpha}^*(p,r,\rho) e^{pt} dp.$$

Особливими точками функції коші  $H_{v,\alpha}^*(p,r,\rho)$  є точки галуження  $p = -\gamma^2$  та  $p = \infty$ . Покладемо  $\sqrt{p + \gamma^2} = i\beta$ , тобто  $p = -(\beta^2 + \gamma^2)$  та розглянемо трансцендентне рівняння

$$\left( \tilde{\alpha}_{11}^1 \frac{v-\alpha}{R} + \tilde{\beta}_{11}^1 \right) J_{v,\alpha}(bR) - \tilde{\alpha}_{11}^1 b^2 R J_{v+1,\alpha+1}(bR) = 0, \quad (2.9)$$

яке при  $\delta_{11}^1 = 0, \gamma_{11}^1 = 0$  співпадає з відомим в математичній літературі [1]. Тут  $\tilde{\alpha}_{11}^1 = \alpha_{11}^1 - (\beta^2 + \gamma^2)\delta_{11}^1, \tilde{\beta}_{11}^1 = \beta_{11}^1 - (\beta^2 + \gamma^2)\gamma_{11}^1$ .

З використанням методикою праці [122] можна показати, що корені  $\beta_n$  трансцендентного рівняння (2.9) утворюють дискретний спектр:  $\{\beta_n\}_{n=1}^{\infty}$ . Таким чином, точки  $p_n = -(\beta_n^2 + \gamma^2)$  для функції  $H_{v,\alpha}^*(p,r,\rho)$  є простими полюсами. За узагальненою теоремою розвинення (Ващенко-Захарченка та Хевісайда) [108] маємо:

$$H_{v,\alpha}(t,r,\rho) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-(\beta_n^2 + \gamma^2)t} \frac{J_{v,\alpha}(b_n r) J_{v,\alpha}(b_n \rho)}{\|J_{v,\alpha}(b_n r)\|_1^2}, b_n = a^{-1} \beta_n. \quad (2.10)$$

У формулі (2.10) квадрат норми власної функції

$$\begin{aligned} \|J_{v,\alpha}(b_n r)\|_1^2 &= \|J_{v,\alpha}(b_n r)\|^2 + G_{0,n} \equiv \int_0^R [J_{v,\alpha}(b_n r)]^2 \sigma r^{2\alpha+1} dr + G_{0,n} = \\ &= 2^{-1} \sigma R^{2\alpha+2} \left[ J_{v,\alpha}^2(b_n R) - 2v J_{v,\alpha}(b_n R) J_{v+1,\alpha+1}(b_n R) + b_n^2 R^2 J_{v+1,\alpha+1}^2(b_n R) \right] + G_{0,n}; \\ G_{0,n} &= \sigma R^{2\alpha+1} (\alpha_{11}^1 \gamma_{11}^1 - \beta_{11}^1 \delta_{11}^1)^{-1} \left[ \delta_{11}^1 d/dr + \gamma_{11}^1 \right] J_{v,\alpha}(b_n r) \Big|_{r=R}^2 \equiv \\ &\equiv \sigma R^{2\alpha+1} (\alpha_{11}^1 \gamma_{11}^1 - \beta_{11}^1 \delta_{11}^1)^{-1} \left[ \delta_{11}^1 \frac{v-\alpha}{R} + \gamma_{11}^1 \right] J_{v,\alpha}(b_n R) - \delta_{11}^1 R b_n^2 J_{v+1,\alpha+1}(b_n R) \Big|^2. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Звідси внаслідок початкової умови (2.2) отримуємо інтегральне зображення:

$$g(r) = \sum_{n=1}^{\infty} \left( \int_0^R g(\rho) J_{v,\alpha}(b_n \rho) \rho^{2\alpha+1} \sigma d\rho \right) \frac{J_{v,\alpha}}{\|J_{v,\alpha}(b_n r)\|_1^2}. \quad (2.12)$$

Інтегральне зображення (2.12) визначає пряме  $H_{v,\alpha}$  й обернене  $H_{v,\alpha}^{-1}$  скінченне інтегральне перетворення Ганкеля 1-го роду із спектральним параметром (в крайовій умові):

$$H_{v,\alpha}[g(r)] = \int_0^R g(r) J_{v,\alpha}(b_n r) r^{2\alpha+1} \sigma dr \equiv g_n, \quad (2.13)$$

$$H_{v,\alpha}^{-1}[g_n] = \sum_{n=1}^{\infty} g_n \frac{J_{v,\alpha}(b_n r)}{\|J_{v,\alpha}(b_n r)\|_1^2} \equiv g(r). \quad (2.14)$$

Мають місце твердження.

**Теорема 2.1.1** (про спектральну функцію): Система власних функцій  $\{V_{v,\alpha}(r, \beta_n) \equiv J_{v,\alpha}(b_n r)\}_{n=1}^{\infty}$  узагальнено ортогональна, повна й замкнута на  $(0, R)$ .

**Доведення:** Теорема доводиться на основі міркувань, викладених в п.1.2 [97].

**Теорема 2.1.2** (типу теореми Стеклова): Якщо функція  $f(r) = B_{v,\alpha}[g(r)]$  неперервно диференційована на  $(0, R)$ , а функція  $g(r)$  задовольняє крайові умови

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{d}{dr} [r^{\alpha-v} g(r)] = 0, \quad \left[ (\alpha_{11}^1 + \delta_{11}^1 B_{v,\alpha}) \frac{d}{dr} + \beta_{11}^1 + \gamma_{11}^1 B_{v,\alpha} \right] g(r) \Big|_{r=R} = 0, \quad (2.15)$$

то функція  $g(r)$  розкладається за системою власних функцій  $\{V_{v,\alpha}(r, \beta_n)\}_{n=1}^{\infty}$  в абсолютно й рівномірно збіжний на множині  $(0, R)$  ряд Фур'є (2.12).

**Доведення:** здійснюється на використанні методики доведення теореми 1.2.2 згідно підходів поданих у працях [96, 97].

**Теорема 2.1.3** (про основну тотожність): Якщо функція  $g(r) \in C^{(3)}(0, R)$  і задовольняє крайові умови

$$\lim_{r \rightarrow 0} \left[ r^{2\alpha+1} \left( \frac{dg}{dr} V_{v,\alpha}(r, \beta_n) - g(r) \frac{d}{dr} V_{v,\alpha}(r, \beta_n) \right) \right] = 0; \quad \left( \tilde{\alpha}_{11,n}^1 \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{11,n}^1 \right) g(r) \Big|_{r=R} = g_R \quad (2.16)$$

то справджується основна тотожність інтегрального перетворення диференціального оператора Бесселя  $a^2 B_{v,\alpha}$ :

$$H_{v,\alpha} \left[ a^2 B_{v,\alpha} [g(r)] \right] = -\beta_n^2 g_n + \left( \tilde{\alpha}_{11,n}^1 \right)^{-1} R^{2\alpha+1} V_{v,\alpha}(R, \beta_n) g_R, \quad (2.17)$$

$$\tilde{\alpha}_{11,n}^1 = \alpha_{11}^1 - (\beta_n^2 + \gamma^2) \delta_{11}^1, \quad \tilde{\beta}_{11,n}^1 = \beta_{11}^1 - (\beta_n^2 + \gamma^2) \gamma_{11}^1.$$

**Доведення:** головна тотожність (2.17) встановлюється методом дворазового інтегрування частинами під знаком інтегралу, з використанням властивостей функцій  $V_{v,\alpha}(r, \beta_n)$  та  $y(z)$  і умов (2.16).

**Зауваження:** Внаслідок трансцендентного рівняння (2.9) маємо тотожність

$$\left( \alpha_{11}^1 \gamma_{11}^1 - \beta_{11}^1 \delta_{11}^1 \right) J_{v,\alpha}(\beta_n R) = \tilde{\alpha}_{11,n}^1 \left[ \left( \delta_{11}^1 \frac{v-\alpha}{R} + \gamma_{11}^1 \right) V_{v,\alpha}(R, \beta_n) - R \delta_{11}^1 b_n^2 V_{v+1,\alpha+1}(R, \beta_n) \right].$$

При цьому рівність (2.17) набуває вигляду:

$$H_{v,\alpha} \left[ a^2 B_{v,\alpha} [g(r)] \right] = -\beta_n^2 g_n + \frac{R^{2\alpha+1} g_R}{\alpha_{11}^1 \gamma_{11}^1 - \beta_{11}^1 \delta_{11}^1} \left[ \left( \delta_{11}^1 \frac{v-\alpha}{R} + \gamma_{11}^1 \right) V_{v,\alpha}(R, \beta_n) - R \delta_{11}^1 b_n^2 V_{v+1,\alpha+1}(R, \beta_n) \right].$$

Наявність тотожності (2.17) дає можливість застосовувати запроваджене скінченне інтегральне перетворення Ганкеля 1-го роду із спектральним параметром для знаходження точних аналітичних розв'язків розглядуваних нестационарних математичних моделей переносу. Логічна схема побудови розв'язків таких квазістатичних і динамічних моделей подана в [131].

### 2.1.2. Скінченне інтегральне перетворення типу Ганкеля 2-го роду для однорідного обмеженого циліндричного середовища

Розглядається методологія побудови скінченного інтегрального перетворення типу Ганкеля 2-го роду для однорідного обмеженого циліндричного середовища  $I_0 = \{r : r \in (R_0, R); R_0 > 0, R < \infty\}$ , породженого диференціальним оператором Бесселя  $B_{v,\alpha}$  і крайовими диференціальними операторами

$$\mathcal{L}_{11}^m = \left( \alpha_{11}^1 + \delta_{11}^1 \frac{\partial^m}{\partial t^m} \right) \frac{\partial}{\partial r} + \beta_{11}^1 + \gamma_{11}^1 \frac{\partial^m}{\partial t^m}, m = \overline{1,2}, \quad |\alpha_{11}^1| + |\beta_{11}^1| \neq 0$$

для квазістатичних задач ( $m=1$ ) і динамічних задач ( $m=2$ ), що описує вплив швидкості зміни градієнтів основних параметрів переносу на крайових поверхнях  $r = R_0$ ,  $r = R$ . Побудова означених інтегральних перетворень для часткового випадку  $\delta_{11}^1 = \gamma_{11}^1 \equiv 0$  розглянуто в праці [122]. Наявність похідної по  $t$  в крайовому операторі  $\mathcal{L}_{11}^m, m = \overline{1,2}$  приводить до появи спектрального параметра в крайовій умові відповідної спектральної задачі Штурма-Ліувілля.

Розглянемо сингулярну спектральну задачу Штурма-Ліувілля: побудувати в  $I_0$  розв'язок диференціального рівняння Беселля

$$(B_{v,\alpha} + \beta^2)V_{v,\alpha}(r, \beta) = 0 \quad (2.18)$$

за крайовими умовами

$$\left( \tilde{\alpha}_{11}^0 \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{11}^0 \right) V_{v,\alpha} \Big|_{r=R_0} = 0; \quad \left( \tilde{\alpha}_{11}^1 \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{11}^1 \right) V_{v,\alpha} \Big|_{r=R_1} = 0; \quad (2.19)$$

Загальним розв'язком рівняння (2.18) є функція

$$V_{v,a}(r, \beta) = A \cdot J_{v,a}(\beta r) + B \cdot N_{v,a}(\beta r)$$

Крайові умови (2.19) для визначення сталих  $A$ ,  $B$  дають алгебраїчну систему з двох рівнянь:

$$\begin{aligned} u_{v,a;11}^{01}(\beta R_0)A + u_{v,a;11}^{01}(\beta R_0)B &= 0, \\ u_{v,a;11}^{11}(\beta R_1)A + u_{v,a;11}^{12}(\beta R_1)B &= 0. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Для того, щоб алгебраїчна система (2.20) мала ненульовий розв'язок, необхідно і досить, щоб її визначник

$$\delta_{v,a}(\beta) \equiv u_{v,a;11}^{01}(\beta R_0)u_{v,a;11}^{12}(\beta R_1) - u_{v,a;11}^{12}(\beta R_0)u_{v,a;11}^{01}(\beta R_1) = 0 \quad (2.21)$$

Властивості коренів трансцендентного рівняння (2.21) (власних чисел диференціального оператора  $B_{v,a}$  описує твердження.

**Теорема 3.1`1 (про дискретний спектр).** Корені  $\beta_j$  трансцендентного рівняння  $\delta_{v,a}(\beta)$  утворюють дискретний спектр: дійсні, різні, симетрично розташовані відносно точки  $\beta = 0$ , їх модулі складають монотонно зростаючу послідовність з єдиною граничною точкою  $\beta = \infty$ .

**Доведення:** Теорема доводиться на основі міркувань, викладених в Т.2.2.1 Якщо покласти  $A = u_{v,a;11}^{02}(\beta_j R_0)$ ,  $B = -u_{v,a;11}^{01}(\beta_j R_0)$ , то одержимо, що власному числу  $\beta_j$  відповідає власна функція

$$V_{v,a}(r, \beta_j) = u_{v,a;11}^{02}(\beta_j R_0) J_{v,a;11}(\beta_j R_0) - u_{v,a;11}^{01}(\beta_j R_0) N_{v,a}(\beta_j r) \quad (2.22)$$

**Теорема 3.1`2 (про дискретну функцію).** Система власних функцій  $\{V_{v,a}(r, \beta_j)\}_{j=1}^{\infty}$  узагальнено ортогональна, повна і замкнута на  $[R_0, R_1]$ .

**Доведення:** Достатньо довести, що система  $\{V_{v,a}(r, \beta_j)\}_{j=1}^{\infty}$  узагальнено ортогональна. Для  $\beta_j \neq \beta_s$  функція  $V_{v,a}(r, \beta_j)$  та  $V_{v,a}(r, \beta_s)$  задовольняють відповідно рівняння:

$$(\beta_{v,a} + \beta_j^2)V_{v,a}(r, \beta_j) = 0; \quad (B_{v,a} + \beta_s^2)V_{v,a}(r, \beta_s) = 0.$$

Помножимо перше з цих рівнянь на функцію  $r^{2a+1}V_{v,a}(r, \beta_s)$ , а друге на на функцію  $r^{2a+1}V_{v,a}(r, \beta_j)$ , і віднімемо від першого друге:

$$(\beta_j^2 - \beta_s^2)V_{v,a}(r, \beta_j)V_{v,a}(r, \beta_s)r^{2a+1} = \frac{d}{dr} \left[ r^{2a+1} \left( V_{v,a}(r, \beta_j) \frac{d}{dr} V_{v,a}(r, \beta_s) - V_{v,a}(r, \beta_s) \frac{d}{dr} V_{v,a}(r, \beta_j) \right) \right]$$

Якщо помножити останню рівність на  $dr$  і проінтегрувати  $r$  від  $r = R_0$  до  $r = R_1$ , то отримаємо:

$$(\beta_j^2 - \beta_s^2) \int_{R_0}^{R_1} V_{v,a}(r, \beta_j) V_{v,a}(r, \beta_s) r^{2a+1} dr = \left[ r^{2a+1} (V_{v,a}(r, \beta_j) \frac{d}{dr} V_{v,a}(r, \beta_s) - V_{v,a}(r, \beta_s) \frac{d}{dr} V_{v,a}(r, \beta_j)) \right]_{R_0}^{R_1} \quad (2.23)$$

Розглянемо для  $m = 0.1$  вираз

$$Z_m(r, \beta_j, \beta_s) \equiv \left[ a_{11}^m \frac{d}{dr} V_{v,a}(r, \beta_j) + \beta_{11}^m V_{v,a}(r, \beta_j) \right] \left[ \delta_{11}^m \frac{d}{dr} V_{v,a}(r, \beta_s) + \gamma_{11}^m V_{v,a}(r, \beta_j) \right] - \left[ a_{11}^m \frac{d}{dr} V_{v,a}(r, \beta_s) + \beta_{11}^m V_{v,a}(r, \beta_s) \right] \left[ \delta_{11}^m \frac{d}{dr} V_{v,a}(r, \beta_j) + \gamma_{11}^m V_{v,a}(r, \beta_j) \right]$$

З одного боку вираз

$$Z_m(r, \beta_j, \beta_s) = (\beta_{11}^m \delta_{11}^m - a_{11}^m \gamma_{11}^m) (V_{v,a}(r, \beta_j) \frac{d}{dr} V_{v,a}(r, \beta_s) - V_{v,a}(r, \beta_s) \frac{d}{dr} V_{v,a}(r, \beta_j)); m = 0,1 \quad (2.24)$$

Оскільки

$$(\tilde{a}_{11}^0 \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{11}^0) V_{v,a}(r, \beta_j) \Big|_{r=R_0} = \left[ (a_{11}^0 \frac{d}{dr} + \beta_{11}^0) V_{v,a}(r, \beta_j) - \beta_j^2 (\delta_{11}^0 \frac{d}{dr} + \gamma_{11}^0) V_{v,a}(r, \beta_j) \right] \Big|_{r=R_0} \equiv 0$$

То має місце рівність

$$\left[ a_{11}^0 \frac{d}{dr} V_{v,a}(r, \beta_j) + \beta_{11}^0 V_{v,a}(r, \beta_j) \right] \Big|_{r=R_0} \equiv \beta_j^2 (\delta_{11}^0 \frac{d}{dr} V_{v,a}(r, \beta_j) + \gamma_{11}^0 V_{v,a}(r, \beta_j)) \Big|_{r=R_0}. \quad (2.25)$$

Аналогічно знаходимо, що

$$\left[ a_{11}^1 \frac{d}{dr} V_{v,a}(r, \beta_j) + \beta_{11}^1 V_{v,a}(r, \beta_j) \right] \Big|_{r=R_1} \equiv \beta_j^2 (\delta_{11}^1 \frac{d}{dr} V_{v,a}(r, \beta_j)) \quad (2.26)$$

Внаслідок рівностей (2.25), (2.26) маємо:

$$Z_0(R_0, \beta_j, \beta_s) = (\beta_j^2 - \beta_s^2) \left[ \delta_{11}^0 \frac{d}{dr} V_{v,a}(R_0, \beta_j) + \gamma_{11}^0 V_{v,a}(R_0, \beta_j) \right] \times \left[ \delta_{11}^0 \frac{d}{dr} V_{v,a}(R_0, \beta_s) + \gamma_{11}^0 V_{v,a}(R_0, \beta_s) \right] \quad (2.27)$$

$$Z_1(R_1, \beta_j, \beta_s) = (\beta_j^2 - \beta_s^2) \left[ \delta_{11}^0 \frac{d}{dr} V_{v,a}(R_0, \beta_j) + \gamma_{11}^0 V_{v,a}(R_0, \beta_j) \right] \times \left[ \delta_{11}^0 \frac{d}{dr} V_{v,a}(R_0, \beta_s) + \gamma_{11}^0 V_{v,a}(R_0, \beta_s) \right] \quad (2.28)$$

Порівнюючи (2.24) з (2.27) при  $m = 0$ ,  $r = R_0$  та (2.12) з (2.28) при  $m = 1$ ,  $r = R_1$ , отримуємо рівності:

$$\left[ V_{v,a}(r, \beta_j) \frac{d}{dr} V_{v,a}(r, \beta_s) - V_{v,a}(r, \beta_s) \frac{d}{dr} V_{v,a}(r, \beta_j) \right] \Big|_{r=R_0} = \frac{\beta_j^2 - \beta_s^2}{-a_{11}^0 \gamma_{11}^0 + \beta_{11}^0 \delta_{11}^0} \times$$



$$\begin{aligned} & \times \left[ \delta_{11}^0 \frac{d}{dr} V_{v,a}(R_0, \beta_j) + \gamma_{11}^0 V_{v,a}(R_0, \beta_j) \right] \left[ \delta_{11}^0 \frac{d}{dr} V_{v,a}(R_0, \beta_s) + \gamma_{11}^0 V_{v,a}(R_0, \beta_s) \right]. \\ & \left[ V_{v,a}(r, \beta_j) \frac{d}{dr} V_{v,a}(r, \beta_s) - V_{v,a}(r, \beta_s) \frac{d}{dr} V_{v,a}(r, \beta_j) \right] \Big|_{r=R_1} = - \frac{\beta_j^2 - \beta_s^2}{-a_{11}^0 \gamma_{11}^1 - \beta_{11}^1 \delta_{11}^1} \times \\ & \left[ \delta_{11}^1 \frac{d}{dr} V_{v,a}(R_1, \beta_j) + \gamma_{11}^1 V_{v,a}(R_1, \beta_j) \right] \left[ \delta_{11}^1 \frac{d}{dr} V_{v,a}(R_1, \beta_s) + \gamma_{11}^1 V_{v,a}(R_1, \beta_s) \right]. \end{aligned}$$

В припущенні, що  $\beta_{11}^0 \delta_{11}^0 - a_{11}^0 \gamma_{11}^0 > 0$ ,  $a_{11}^1 \gamma_{11}^1 - \beta_{11}^1 \delta_{11}^1 > 0$ , в результаті підстановки двох останніх значень виразів в рівність (2.23) і скорочення на  $(\beta_j^2 - \beta_s^2) \neq 0$ , одержуємо, що

$$\int_{R_0}^{R_1} V_{v,a}(r, \beta_j) V_{v,a}(r, \beta_s) r^{2a+1} dr + \frac{R_0^{2a+1}}{\beta_{11}^0 \delta_{11}^0 - a_{11}^0 \gamma_{11}^0} V_{v,a;11}^0(R_0; \beta_j) V_{v,a;11}^0(R_0; \beta_s) + \frac{R_1^{2a+1}}{a_{11}^1 \gamma_{11}^1 - \beta_{11}^1 \delta_{11}^1} V_{v,a;11}^1(R_1, \beta_s) = 0; \quad (2.29)$$

$$V_{v,a;11}^m(R_m, \beta) = \delta_{11}^m \frac{d}{dr} V_{v,a}(R_m, \beta) + \gamma_{11}^m V_{v,a}(R_m, \beta); m = \overline{0,1}.$$

Оскільки звичайний скалярний добуток  $(V_{v,a}(r, \beta_j), V_{v,a}(r, \beta_s)) = \int_{R_0}^{R_1} V_{v,a}(r, \beta_j) V_{v,a}(r, \beta_s) r^{2a+1} dr$ ,

то рівність (2.29) показує, що скалярний добуток

$$\begin{aligned} (V_{v,a}(r, \beta_j), V_{v,a}(r, \beta_s))_1 & \equiv (V_{v,a}(r, \beta_j), V_{v,a}(r, \beta_s)) + \frac{R_0^{2a+1}}{\beta_{11}^0 \delta_{11}^0 - a_{11}^0 \gamma_{11}^0} V_{v,a;11}^0(R_0, \beta_j) V_{v,a;11}^0(R_1, \beta_s) + \\ & + \frac{R_1^{2a+1}}{a_{11}^1 \gamma_{11}^1 - \beta_{11}^1 \delta_{11}^1} V_{v,a;11}^1(R_1, \beta_j) V_{v,a;11}^1(R_1, \beta_s) = 0 \end{aligned} \quad (2.30)$$

Таким чином для  $\beta_j \neq \beta_s$  скалярний добуток  $(V_{v,a}(r, \beta_j), V_{v,a}(r, \beta_s))_1 = 0$ .

Отже, система  $\{V_{v,a}(r, \beta_j)\}$  є узагальнено ортогональна. При цьому квадрат норми власної функції обчислюється за правилом:

$$\|V_{v,a}(r, \beta_j)\|_1^2 = \|V_{v,a}(r, \beta_j)\|^2 + R_0^{2a+1} \frac{\left[ V_{v,a;11}^0(R_0, \beta_j) \right]^{2-1}}{\beta_{11}^0 \delta_{11}^0 - a_{11}^0 \gamma_{11}^0} + R_1^{2a+1} \frac{\left[ V_{v,a;11}^1(R_1, \beta_j) \right]^2}{a_{11}^1 \gamma_{11}^1 - \beta_{11}^1 \delta_{11}^1}. \quad (2.31)$$

Позначимо додатні корені трансцендентного рівняння (2.5') в порядку зростання через  $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_j, \dots$ . Як висновок із вищенаведених теорем одержуємо що дискретному спектру  $\{\beta_j\}_{j=1}^{\infty}$  відповідає дискретна функція  $\{V_{v,a}(r, \beta_j)\}_{j=1}^{\infty}$ .

Можна ставити питання про зображення достатньо гладкої функції  $g(r)$  в ряд Фур'є за системою  $\{V_{v,a}(r, \beta_j)\}_{j=1}^{\infty}$ :

$$q(r) = \sum_{j=1}^{\infty} \int_{R_0}^{R_1} q(\rho) V_{v,a}(\rho, \beta_j) \rho^{2a+1} d\rho \frac{V_{v,a}(r, \beta_j)}{\|V_{v,a}(\rho, \beta_j)\|_1^2} \quad (2.32)$$

Ряд Фур'є (2.32) породжує пряме  $H_{v,a}$  і обернене  $H_{v,a}^{-1}$  скінченне інтегральне перетворення типу Ганкеля 2-го роду із спектральним параметром:

$$H_{v,a} \left[ g(r) \right] = \int_{R_0}^{R_1} g(r) V_{v,a}(r, \beta_j) r^{2a+1} dr \equiv g_j, \quad (2.33)$$

$$H_{v,a}^{-1} \left[ g_j \right] = \sum_{j=1}^{\infty} g_j \frac{V_{v,a}(r, \beta_j)}{\|V_{v,a}(r, \beta_j)\|_1^2} \equiv g(r). \quad (2.34)$$

Математична обґрунтування формул (2.33) є (2.34) є твердження.

**Теорема 3.1'3 (аналог теореми Стеклова):** Якщо функція  $g(r)$  має три неперервних похідних на  $(R_0, R_1)$  (функція  $f(r) = B_{v,a} \left[ g(r) \right]$  неперервно диференційована і задовольняє крайові умови, то вона зображується абсолютно й рівномірно збіжним рядом Фур'є (2.32).

**Доведення :** Доведення теореми подано в [131].

Застосування запровадженого скінченного інтегрального перетворення Ганкеля 2-роду до побудови точних аналітичних розв'язків математичних моделей масопереносу опирається на основну тотожність інтегрального перетворення диференціального оператора  $B_{v,a}$ .

**Теорема 3.1.4.** (про основну тотожність) Якщо функція  $q(r)$  має три неперервних похідних на  $(R_0, R_1)$  і задовольняє крайові умови

$$(\tilde{a}_{11}^0 \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{11}^0)q(r) \Big|_{r=R_0} = g_0, \quad (\tilde{a}_{11}^1 \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{11}^1)q(r) \Big|_{r=R_1} = g_1, \quad (2.35)$$

то має місце основна тотожність інтегрального перетворення диференціального оператора Бесселя  $B_{v,a}$ :

$$\begin{aligned} H_{v,a} \left[ B_{v,a} [q(r)] \right] &= -\beta_j^2 q_j + R_0^{2a+1} (\beta_{11}^0 \delta_{11}^0 - a_{11}^0 \gamma_{11}^0)^{-1} V_{v,a;11}^0(R_0, \beta_j) q_0 + \\ &+ R_1^{2a+1} (a_{11}^1 \gamma_{11}^1 - \beta_{11}^1 \delta_{11}^1)^{-1} V_{v,a;11}^1(R_1, \beta_j) q_1 \end{aligned} \quad (2.36)$$

**Доведення:** Інтегруючи два рази частинами під знаком інтегралу в лівій частині (2.36), маємо:

$$\begin{aligned} H_{v,a} \left[ B_{v,a} [q(r)] \right] &= \int_{R_0}^{R_1} B_{v,a} [q(r)] V_{v,a}(r, \beta_j) r^{2a+1} dr = r^{2a+1} (q'(r) V_{v,a}(r, \beta_j) - \\ &- q(r) \frac{d}{dr} V_{v,a}(r, \beta_j)) \Big|_{R_0}^{R_1} + \int_{R_0}^{R_1} q(r) B_{v,a} [V_{v,a}(r, \beta_j)] r^{2a+1} dr. \end{aligned} \quad (2.37)$$

Тотожність  $\tilde{a}_{11}^m V_{v,a}^{-1}(R_m, \beta_j) + \tilde{\beta}_{11}^m V_{v,a}(R_m, \beta_j) \equiv 0$  помножимо на  $\delta_{11}^m$  і перепишемо так:

$$\tilde{a}_{11}^m (\delta_{11}^m V_{v,a}'(R_m, \beta_j) + \gamma_{11}^m V_{v,a}(R_m, \beta_j)) - \tilde{a}_{11}^m \gamma_{11}^m V_{v,a}(R_m, \beta_j) + \tilde{\beta}_{11}^m \delta_{11}^m V_{v,a}(R_m, \beta_j) \equiv 0.$$

Звідси знаходимо, що

$$\tilde{a}_{11}^m V_{v,a;11}^m(R_m, \beta_j) = (a_{11}^m \gamma_{11}^m - \beta_{11}^m \delta_{11}^m) V_{v,a}(R_m, \beta_j); m = \overline{0,1}$$

При  $\tilde{a}_{11}^0 \neq 0$  безпосередньо маємо:

$$\begin{aligned} (q' V_{v,a} - q V_{v,a}') \Big|_{r=R_0} &= \frac{1}{\tilde{a}_{11}^0} (\tilde{a}_{11}^0 q' + \tilde{\beta}_{11}^0 q) \Big|_{r=R_0} V_{v,a}(R_0, \beta_j) - \\ &- \frac{1}{\tilde{a}_{11}^0} (\tilde{a}_{11}^0 \frac{d}{dr} V_{v,a} + \tilde{\beta}_{11}^0 V_{v,a}) \Big|_{r=R_0} q(R_0) = q_0 (\tilde{a}_{11}^0)^{-1} V_{v,a}(R_0, \beta_j) = q_0 (a_{11}^0 \gamma_{11}^0 - \beta_{11}^0 \delta_{11}^0)^{-1} V_{v,a;11}^0(R_0, \beta_j). \end{aligned}$$

Аналогічно одержуємо:

$$(q'V_{v,a} - qV'_{v,a}) \Big|_{r=R_1} = q_1 (a_{11}^1 \gamma_{11}^1 - \beta_{11}^1 \delta_{11}^1)^{-1} V_{v,a;11}^1(R_1, \beta_j).$$

Внаслідок рівняння Бесселя (2.1') маємо  $B_{v,a} = [V_{v,a}(r, \beta_j)] \equiv -\beta_j^2 V_{v,a}(r, \beta_j)$  та підстановка останніх трьох виразів у (2.37) приводить до (2.36).

На основі тотожності

$$J_{v,a}(R, \beta_j) \frac{d}{dr} N_{v,a}(R, \beta_j) - N_{v,a}(R, \beta_j) \frac{d}{dr} J_{v,a}(R, \beta_j) = \frac{2}{\pi} \frac{1}{\beta_j^{2a} R^{2a+1}} \quad \text{знаходимо, що}$$

$$(a_{11}^0 \gamma_{11}^0 - \beta_{11}^0 \delta_{11}^1)^{-1} V_{v,a;11}^0(R_0, \beta_j) = \frac{2}{\pi} \frac{1}{\beta_j^{2a} R^{2a+1}},$$

$$(a_{11}^1 \gamma_{11}^1 - \beta_{11}^1 \delta_{11}^1)^{-1} V_{v,a;11}^1(R_1, \beta_j) = \frac{2}{\pi} \frac{1}{\beta_j^{2a} R_1^{2a+1}} \frac{u_{v,a;11}^{01}(R_0 \beta_j)}{u_{v,a;11}^{11}(R_1 \beta_j)}.$$

Тотожність (2.36) набуває вигляду:

$$H_{v,a} [B_{v,a} [q(r)]] = -\beta_j^2 q_j + \frac{2}{\pi} \frac{1}{\beta_j^{2a}} \left( -1 + \frac{u_{v,a;11}^{01}(R_0 \beta_j)}{u_{v,a;11}^{11}(R_1 \beta_j)} \right).$$

Приклади схем застосування вищеописаного методу до побудови точних аналітичних розв'язків математичних моделей масопереносу з врахуванням швидкостей зміни градієнтів концентрацій на границях подані в [131].

## 2.2. Скінчене гібридне інтегральне перетворення типу Ганкеля першого роду для обмежених неоднорідних n-складових циліндричних середовищ

Запровадимо скінчене гібридне інтегральне перетворення типу Ганкеля 1-го роду для обмежених n-складових неоднорідних циліндричних середовищ,

визначених областю  $I_n = \left\{ r : r \in \bigcup_{k=1}^{n+1} (R_{k-1}, R_k) R_0 = 0, R_{n+1} \equiv R < \infty \right\}$  і породженого

диференціальним оператором Бесселя  $B_{(v,\alpha)} = \sum_{k=1}^{n+1} D_k \Theta(r - R_{k-1}) \Theta(R_k - r) B_{v_k, \alpha_k}$

в припущенні, що спектральний параметр  $\beta$  входить в крайову умову при  $r = R$ , та систему інтерфейсних умов в  $r = R_k, k = \overline{1, n}$  врахуванням швидкостей зміни градієнтів концентрацій на масообмінних поверхнях.

Розглянемо сингулярну задачу Штурма – Ліувілля про конструкцію обмеженого на множині  $I_n$  розв'язку системи диференціальних рівнянь Бесселя

$$(B_{v_j, a_j} + b_j^2) V_{(v, a); j}(r, \beta) = 0, r \in (R_{j-1}, R_j), j = \overline{1, n+1}; R_0 = 0 \quad (2.38)$$

за крайовими умовами

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{d}{dr} (r^{\alpha_1 - v_1} V_{(v, a); 1}(r, \beta)) = 0; (\tilde{a}_{22}^{n+1} \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{22}^{n+1}) V_{(v, a); n+1}(r, \beta) \Big|_{r=R_{n+1}} = 0 \quad (2.39)$$

та системою  $n$ - інтерфейсних умов

$$[(\tilde{a}_{j1}^k \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{j1}^k) V_{(v, a); k}(r, \beta) - (\tilde{a}_{j2}^k \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{j2}^k) V_{(v, a); k+1}(r, \beta)] \Big|_{r=R_k} = 0; j = \overline{1, 2}; k = \overline{1, n}. \quad (2.40)$$

Тут  $(v, \alpha) = \{v_1, \alpha_1; v_2, \alpha_2; \dots; v_n, \alpha_n; v_{n+1}, \alpha_{n+1}\}$ ,  $b_j^2 = D_j^{-1}(\beta^2 + k_j^2)$ ,  $D_j > 0$ ;

$$\tilde{a}_{ij}^k = a_{ij}^k - (\beta^2 + \gamma^2) \delta_{ij}^k, \tilde{\beta}_{ij}^k = \beta_{ij}^k - (\beta^2 + \gamma^2) \gamma_{ij}^k; \beta \in (0, \infty);$$

$$k_j^2 = \gamma^2 - \gamma_j^2 \geq 0, \gamma_j^2 \geq 0, \gamma^2 = \max\{\gamma_1^2; \gamma_2^2; \dots; \gamma_n^2; \gamma_{n+1}^2\}.$$

Визначимо матриці:

$$A_{11, k} = \begin{bmatrix} a_{11}^k & \beta_{11}^k \\ a_{21}^k & \beta_{21}^k \end{bmatrix}, A_{12, k} = \begin{bmatrix} \delta_{11}^k & \gamma_{11}^k \\ \delta_{21}^k & \gamma_{21}^k \end{bmatrix}, A_{21, k} = \begin{bmatrix} a_{12}^k & \beta_{12}^k \\ a_{22}^k & \beta_{22}^k \end{bmatrix}, A_{22, k} = \begin{bmatrix} \delta_{12}^k & \gamma_{12}^k \\ \delta_{22}^k & \gamma_{22}^k \end{bmatrix} \quad \text{та}$$

розглянемо числа:  $c_{j1, k} = a_{2j}^k \beta_{1j}^k - a_{1j}^k \beta_{2j}^k > 0, c_{j2, k} = \delta_{2j}^k \gamma_{1j}^k - \delta_{1j}^k \gamma_{2j}^k \geq 0$ ; тут  $c_{ij; mn}^{i_1 j_1, k}$  -

визначник другого порядку, перший стовпець якого позначено через  $i_1$  а другий -  $j_1$ . При цьому  $i_1$ -перший чи другий стовпець матриці  $A_{ij, k}$ , а  $j_1$ -перший чи другий стовпець матриці  $A_{mn, k}$ .

Найуживанішими будуть числа:

$$c_{j1, j2}^{12, k} = a_{1j}^k \gamma_{2j}^k - a_{2j}^k \gamma_{1j}^k, c_{j1, j2}^{21, k} = \beta_{1j}^k \delta_{2j}^k - \beta_{2j}^k \delta_{1j}^k, j = 1, 2;$$

$$c_{j1, j2}^{12, k} = a_{1j}^k \gamma_{2j}^k - a_{2j}^k \gamma_{1j}^k, c_{j1, j2}^{21, k} = \beta_{1j}^k \delta_{2j}^k - \beta_{2j}^k \delta_{1j}^k, j = 1, 2;$$

Припустимо також виконання умов:

$$c_{j2,k} = 0, c_{j1,j2}^{12,k} = c_{j1,j2}^{21,k}; j = 1, 2; k = \overline{1, n}. \quad (2.41)$$

Оскільки фундаментальну систему розв'язків для рівняння (2.8) утворюють функції  $J_{v_j a_j}(b_j r)$  та  $N_{v_j a_j}(b_j r)$  то розв'язок крайової задачі (2.38) – (2.40) будуємо за правилами

$$V_{(v,a);j}(r, \beta) = A_j J_{v_j a_j}(b_j r) + B_j N_{v_j a_j}(b_j r); j = \overline{1, n+1}, B_1 = 0. \quad (2.42)$$

Система інтерфейсних умов (2.40) і крайова умова на межі  $r = R_{n+1}$  для визначення  $(2n+1)$ -го невідомого  $A_0, A_j, B_j (j = \overline{1, n+1})$  дають алгебраїчну систему з  $(2n+1)$ -го рівняння:

$$\begin{aligned} u_{v_1, a_1; j1}^{11}(b_1 R_1) A_1 - u_{v_2, a_2; j2}^{11}(b_2 R_1) A_2 - u_{v_2, a_2; j2}^{12}(b_2 R_1) B_2 &= 0, \\ u_{v_k, a_k; j1}^{k1}(b_k R_k) A_k + u_{v_k, a_k; j1}^{k2}(b_k R_k) B_k - u_{v_{k+1}, a_{k+1}; j2}^{k1}(b_{k+1} R_k) A_{k+1} + \\ + u_{v_k, a_k; j1}^{k2}(b_k R_k) B_k - u_{v_{k+1}, a_{k+1}; j2}^{k1}(b_{k+1} R_k) A_{k+1} - u_{v_{k+1}, a_{k+1}; j2}^{k2}(b_{k+1} R_k) B_{k+1} &= 0; \\ j = 1, 2; k = \overline{2, n}; \end{aligned} \quad (2.43)$$

$$u_{v_{n+1}, a_{n+1}; 22}^{n+1,1}(b_{n+1} R_{n+1}) A_{n+1} + u_{v_{n+1}, a_{n+1}; 22}^{n+1,2}(b_{n+1} R_{n+1}) B_{n+1} = 0.$$

Для того, щоб алгебраїчна система (2.43) мала ненульовий розв'язок, необхідно й досить, щоб визначник системи був рівний нулю:

$$\delta_{(v,\alpha)}^{(n)}(\beta) \equiv u_{v_{n+1}, a_{n+1}; 22}^{n+1,1}(b_{n+1} R_{n+1}) \omega_{(v,\alpha)_{n+1}; 2}^{(n)}(\beta) - u_{v_{n+1}, a_{n+1}; 22}^{n+1,2}(b_{n+1} R_{n+1}) \omega_{(v,\alpha)_{n+1}; 1}^{(n)}(\beta) = 0. \quad (2.44)$$

Тут

$$\Psi_{v_k, a_k; v_{k+1}; ij}^k(b_k R_k, b_{k+1} R_k) = u_{v_k, a_k; i1}^{ki}(b_k R_k) \cdot u_{v_{k+1}, a_{k+1}; 22}^{kj}(b_{k+1} R_k) - u_{v_k, a_k; i1}^{ki}(b_k R_k) \cdot u_{v_{k+1}, a_{k+1}; 12}^{kj}(b_{k+1} R_k);$$

$$\omega_{(v,\alpha)_2; m}^{(1)}(\beta) = \Psi_{v_1, a_1; v_2, a_2; 1m}^1(b_1 R_1, b_2 R_1) \equiv \omega_{(v, \alpha)_2; m}^{(1)}(b_1 R_1, b_2 R_1);$$

$$\begin{aligned} \omega_{(v,\alpha)_3; j}^{(2)}(\beta) &= \omega_{(v,\alpha)_2; 2}^{(1)}(\beta) \cdot \Psi_{v_2, a_2; v_3, a_3; 1j}^2(b_2 R_2, b_3 R_2) - \omega_{(v,\alpha)_2; 1}^{(1)}(\beta) \cdot \Psi_{v_2, a_2; v_3, a_3; 2j}^2(b_2 R_2, b_3 R_2) \equiv \\ &\equiv \omega_{(v,\alpha)_3; j}^{(2)}(b_1 R_1, b_2 R_1; b_2 R_2, b_3 R_2); \end{aligned}$$

$$\omega_{(v,\alpha)_{k+1}; j}^{(k)}(\beta) \equiv \omega_{(v,\alpha)_{k+1}; j}^{(k)}(b_1 R_1, b_2 R_1; b_2 R_2, b_3 R_2; \dots; b_k R_k, b_{k+1} R_k) =$$

$$= \omega_{(v,\alpha)_k; 2}^{(k-1)}(\beta) \cdot \Psi_{v_k, a_k; v_{k+1}, a_{k+1}; 1j}^k(b_k R_k, b_{k+1} R_k) - \omega_{(v,\alpha)_k; 1}^{(k-1)}(\beta) \cdot \Psi_{v_k, a_k; v_{k+1}, a_{k+1}; 2j}^k(b_k R_k, b_{k+1} R_k); k = \overline{2, n};$$

$$j = \overline{1, 2}; (k) = 123 \dots k; (v, \alpha)_k = \{v_1, \alpha_1; v_2, \alpha_2; \dots; v_k, \alpha_k\}.$$

Функція  $\delta_{(v,\alpha)}^{(n)}(\beta)$  як комбінація цілих аналітичних стосовно  $\beta$  функцій є цілою аналітичною функцією параметра  $\beta$ . Тому трансцендентне рівняння (2.44) має злічену множину коренів, які не мають скінченної точки згущення. Виявляється, що множина  $\{\beta_j\}$  коренів рівняння (2.44) утворює дискретний спектр.

**Теорема 2.2.1 (про дискретний спектр).** *Корені  $\beta_j$  трансцендентного рівняння (2.44) утворюють дискретний спектр: дійсні, прості, симетричні відносно точки  $\beta=0$  й складають монотонно зростаючу послідовність з єдиною граничною точкою  $\beta = \infty$ .*

**Доведення:** Доведення проводиться за логічною схемою доведення т. 1.2.1 [97, 131].

Позначимо  $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_j, \dots$  додатні корені характеристичного рівняння (2.44) в порядку їх зростання. Тоді кожному власному числу  $\beta_j$  диференціального оператора  $\beta_{(v,\alpha)}$  відповідає нетривіальний розв'язок алгебраїчної системи (2.43).

Підставимо в системи (2.439)  $\beta = \beta_j$  й відкинемо останнє рівняння як лінійно залежне. При  $b_{ij} = D_i^{-1}(\beta_j^2 + k_j^2)^{1/2}$ , ( $i = \overline{1, n+1}$ ) рівняння, що залишилися, утворюють алгебраїчну систему:

$$\begin{aligned} u_{v_2, \alpha_2; j2}^{11} (b_{2j} R_1) A_2 - u_{v_2, \alpha_2; j2}^{12} (b_{2j} R_1) B_2 &= u_{v_1, \alpha_1; j1}^{11} (b_{1j} R_1) A_1; \\ u_{v_k, \alpha_k; j1}^{k1} (b_{kj} R_k) A_k + u_{v_k, \alpha_k; j1}^{k2} (b_{kj} R_k) B_k - & \\ - u_{v_{k+1}, \alpha_{k+1}; j2}^{k1} (b_{k+1, j} R_k) A_{k+1} - u_{v_{k+1}, \alpha_{k+1}; j2}^{k2} (b_{k+1, j} R_k) B_{k+1} &= 0; \\ i = \overline{1, 2}; k = \overline{1, 2}. \end{aligned} \tag{2.45}$$

При виконанні рівностей (2.41) визначник алгебраїчної системи (2.45) є відмінним від нуля:

$$\Delta_{(v,\alpha)}^{(n)}(\beta_j) \equiv \prod_{k=1}^n \Delta_{\alpha_{k+1}}^k = \prod_{k=1}^n \frac{2c_{21,k}}{\pi R_k^{2\alpha_{k+1}+1} b_{k+1,j}^{2\alpha_{k+1}}} \neq 0 \quad (2.46)$$

Поклавши  $A_1 = \Delta_{(v,\alpha)}^{(n)}(\beta_j)$ , з алгебраїчної системи (2.45) знаходимо рекурентні співвідношення:

$$A_{k+1} = \frac{1}{\Delta_{\alpha_{k+1}}^k} \left[ \begin{array}{l} A_k \Psi_{v_k, \alpha_k; v_{k+1}, \alpha_{k+1}}^k; 12 \left( b_{kj}^{R_k}, b_{k+1, j}^{R_k} \right)_+ \\ + B_k \Psi_{v_k, \alpha_k; v_{k+1}, \alpha_{k+1}}^k; 22 \left( b_{kj}^{R_k}, b_{k+1, j}^{R_k} \right) \end{array} \right],$$

$$B_{k+1} = -\frac{1}{\Delta_{\alpha_{k+1}}^k} \left[ \begin{array}{l} A_k \Psi_{v_k, \alpha_k; v_{k+1}, \alpha_{k+1}}^k; 11 \left( b_{kj}^{R_k}, b_{k+1, j}^{R_k} \right)_+ \\ + B_k \Psi_{v_k, \alpha_k; v_{k+1}, \alpha_{k+1}}^k; 21 \left( b_{kj}^{R_k}, b_{k+1, j}^{R_k} \right) \end{array} \right].$$

У результаті підстановки одержаних рекурентних співвідношень для визначення  $A_0, A_i, B_i; i = \overline{2, n+1}$  у формули (2.42) одержуємо компоненти власної вектор – функції

$$V_{(v,\alpha)}(r, \beta_j) = \sum_{k=1}^{n+1} \Theta(r - R_{k-1}) \Theta(R_k - r) V_{(v,\alpha);k}(r, \beta_j)$$

спектральної задачі (2.38) – (2.40), які відповідають власному числу  $\beta_j$ :

$$V_{(v,\alpha);1}(r, \beta_j) = \Delta_{(v,\alpha)}^{(n)}(\beta_j) J_{v_1, \alpha_1}(\beta_{1j} r),$$

$$V_{(v,\alpha);k}(r, \beta_j) = \left( \prod_{m=k}^n \Delta_{\alpha_{m+1}}^m \right) [\omega_{(v,\alpha)k;2}^{(k-1)}(\beta_j) J_{v_k, \alpha_k}(b_{kj} r) - \omega_{(v,\alpha)k;1}^{(k-1)}(\beta_j) N_{v_k, \alpha_k}(b_{kj} r)], k = \overline{2, n} \quad (2.47)$$

$$V_{(v,\alpha);n+1}(r, \beta_j) = \omega_{(v,\alpha)_{n+1};2}^{(n)}(\beta_j) J_{v_{n+1}, \alpha_{n+1}}(b_{n+1, j} r) - \omega_{(v,\alpha)_{n+1};1}^{(n)}(\beta_j) N_{v_{n+1}, \alpha_{n+1}}(b_{n+1, j} r).$$



Покладемо для  $k = 1, n$

$$s_k = \frac{1}{D_k} \frac{c_{11,k} c_{11,k+1} \dots c_{11,n}}{c_{21,k} c_{21,k+1} \dots c_{21,n}} \frac{R_k^{2\alpha_{k+1}+1} \dots R_n^{2\alpha_{n+1}+1}}{R_k^{2\alpha_k+1} \dots R_n^{2\alpha_{n+1}+1}}, s_{n+1} = \frac{1}{D_{n+1}}.$$

Визначимо вагову функцію

$$\sigma_r = \sum_{k=1}^{n+1} \Theta(r - R_{k-1}) \Theta(R_k - r) r^{2\alpha_k+1}$$

та функцію

$$\begin{aligned} G_{(v,\alpha);n}(\beta_j, \beta_s) &= \sum_{k=1}^n c_{11,k}^{-2} a_k^2 \sigma_k R_k^{2\alpha_k+1} \{ [\sqrt{a_{11}^k} Z_{(v,\alpha);2k}(R_k \beta_j) + \\ &+ \sqrt{a_{22}^k} Z_{(v,\alpha);1k}(R_k \beta_j)] [\sqrt{a_{11}^k} Z_{(v,\alpha);2k}(R_k \beta_s) + \sqrt{a_{22}^k} Z_{(v,\alpha);1k}(R_k \beta_s)] + \\ &+ c_{11,k} [\sqrt{c_{21,22}^{-11,k}} V'_{(v,\alpha);k+1}(R_k \beta_j) + \sqrt{c_{21,22}^{-22,k}} V_{(v,\alpha);k+1}(R_k \beta_j)] \times \\ &\times [\sqrt{c_{21,22}^{-11,k}} V'_{(v,\alpha);k+1}(R_k \beta_s) + \sqrt{c_{21,22}^{-22,k}} V_{(v,\alpha);k+1}(R_k \beta_s)] + \\ &+ \frac{a_{n+1}^2 \sigma_{n+1} R_{n+1}^{2\alpha_{n+1}+1}}{\alpha_{22}^{n+1} \gamma_{22}^{n+1} - \beta_{22}^{n+1} \delta_{22}^{n+1}} (\delta_{22}^{n+1} V'_{(v,\alpha);n+1}(R_{n+1}, \beta_j) + \gamma_{22}^{n+1} V_{(v,\alpha);n+1}(R_{n+1}, \beta_j)) \times \end{aligned} \quad (2.48)$$

$$\begin{aligned} \alpha_{22}^k &= \alpha_{21}^k \gamma_{21}^k - \beta_{21}^k \delta_{21}^k \geq 0; \quad \alpha_{j1}^k = \alpha_{j1}^k \gamma_{j1}^k - \beta_{j1}^k \delta_{j1}^k \geq 0; \\ c_{21,22}^{-11,k} &= \alpha_{22}^k \delta_{12}^k - \alpha_{12}^k \delta_{22}^k \geq 0, \quad c_{21,22}^{-22,k} = \beta_{22}^k \gamma_{12}^k - \beta_{12}^k \gamma_{22}^k \geq 0. \end{aligned}$$

Наявність спектральної функції  $V_{(v,\alpha)}(r, \beta_j)$ , вагової функції  $\sigma(r)$  та функції  $G_{(v,\alpha);n}(\beta_j, \beta_s)$  дає можливість визначити скалярний добуток

$$(f(r), q(r))_1 = (f(r), q(r)) + G_{(v,\alpha);n} \equiv \int_0^{R_{n+1}} f(r) q(r) \sigma(r) dr + G_{(v,\alpha);n}(\beta_j, \beta_s). \quad (2.49)$$

**Означення 2.2.1.** система функцій  $\{V_{(v,\alpha)}(r, \beta_j)\}_{j=1}^{\infty}$  називається узагальнено – ортогональною, якщо для будь – яких  $\beta_j \neq \beta_s$  виконується рівність:

$$\left( V_{(v,\alpha)}(r, \beta_j), V_{(v,\alpha)}(r, \beta_s) \right)_1 = 0. \quad (2.50)$$

**Теорема 2.2.2 (про дискретну функцію):** Система власних вектор – функцій  $\left\{V_{(v,\alpha)}(r, \beta_j)\right\}_{j=1}^{\infty}$  утворює дискретну функцію: узагальнено ортогональна, повна й замкнута.

**Доведення:** Достатньо довести, що система  $\left\{V_{(v,\alpha)}(r, \beta_j)\right\}_{j=1}^{\infty}$  узагальнено ортогональна. Для простоти покладемо  $\gamma^2 = 0$ .

Функції  $V_{(v,\alpha);k}(r, \beta_j)$  та  $V_{(v,\alpha);k}(r, \beta_s)$  задовольняють відповідно рівняння:

$$\left(D_k B_{v_k, \alpha_k} + \beta_j^2\right) V_{(v,\alpha);k}(r, \beta_j) = 0,$$

$$\left(D_k B_{v_k, \alpha_k} + \beta_s^2\right) V_{(v,\alpha);k}(r, \beta_s) = 0.$$

Помножимо перше з рівнянь на функцію  $r^{2\alpha_k+1} V_{(v,\alpha);k}(r, \beta_s)$ , а друге функцію  $r^{2\alpha_k+1} V_{(v,\alpha);k}(r, \beta_j)$ , і віднімемо від першого друге:

$$\begin{aligned} & (\beta_j^2 - \beta_s^2) r^{2\alpha_k+1} V_{(v,\alpha);k}(r, \beta_j) r^{2\alpha_k+1} V_{(v,\alpha);k}(r, \beta_s) = \\ & = a_k^2 \frac{d}{dr} \left[ r^{2\alpha_k+1} V_{(v,\alpha);k}(r, \beta_j) \frac{d}{dr} V_{(v,\alpha);k}(r, \beta_s) - V_{(v,\alpha);k}(r, \beta_s) \frac{d}{dr} V_{(v,\alpha);k}(r, \beta_j) \right]. \end{aligned}$$

Помноживши останню рівність на  $\sigma_k dr$ , проінтегрувши по  $r$  від  $r = R_{k-1}$  до  $R_k$  та просумувавши по  $k$  від  $k=n+1$ , отримаємо:

$$\begin{aligned} & (\beta_j^2 - \beta_s^2) \sum_{k=1}^{n+1} \int_{R_{k-1}}^{R_k} V_{(v,\alpha);k}(r, \beta_j) V_{(v,\alpha);k}(r, \beta_s) r^{2\alpha_k+1} \sigma_k dr = \\ & = -a_1^2 \sigma_1 \lim_{r \rightarrow \infty} r^{2\alpha_1+1} \left( V_{(v,\alpha);1}(r, \beta_j) \frac{d}{dr} V_{(v,\alpha);1}(r, \beta_s) - V_{(v,\alpha);1}(r, \beta_s) \frac{d}{dr} V_{(v,\alpha);1}(r, \beta_j) \right) + \\ & + a_{n+1}^2 \sigma_{n+1} R_{n+1}^{2\alpha_{n+1}+1} \left( V_{(v,\alpha);n+1}(R_{n+1}, \beta_j) \frac{d}{dr} V_{(v,\alpha);n+1}(R_{n+1}, \beta_s) - V_{(v,\alpha);n+1}(R_{n+1}, \beta_s) \frac{d}{dr} V_{(v,\alpha);n+1}(R_{n+1}, \beta_j) \right) \times \\ & \times \frac{d}{dr} V_{(v,\alpha);n+1}(R_{n+1}, \beta_j) + \sum_{k=1}^n [a_k^2 \sigma_k r^{2\alpha_k+1} \left( V_{(v,\alpha);k}(r, \beta_j) \frac{d}{dr} V_{(v,\alpha);k}(r, \beta_s) - \right. \\ & \left. - V_{(v,\alpha);k}(r, \beta_s) \frac{d}{dr} V_{(v,\alpha);k}(r, \beta_j) \right) - a_{k+1}^2 \sigma_{k+1} r^{2\alpha_{k+1}+1} \left( V_{(v,\alpha);k}(r, \beta_j) \frac{d}{dr} V_{(v,\alpha);k}(r, \beta_s) - \right. \\ & \left. \times \frac{d}{dr} V_{(v,\alpha);k+1}(r, \beta_s) - V_{(v,\alpha);k+1}(r, \beta_s) \frac{d}{dr} V_{(v,\alpha);k+1}(r, \beta_j) \right) \Big|_{r=R_k} \end{aligned} \quad (2.51)$$

Внаслідок тотожності  $\lim_{r \rightarrow 0} \frac{d}{dr} \left( r^{\alpha_1 - \nu_1} V_{(v, \alpha); 1}(r, \dots) \right) = 0$  позаінтегральний член

при  $r \rightarrow 0$  в правій частині (2.51) перетворюється в нуль.

На межі  $r = R_{n+1} \equiv R$  маємо:

$$\begin{aligned} & [\alpha_{22}^{n+1} V'_{(v, \alpha); n+1}(R, \beta_j) + \beta_{22}^{n+1} V_{(v, \alpha); n+1}(R, \beta_j)] [\delta_{22}^{n+1} V'_{(v, \alpha); n+1}(R, \beta_s) + \\ & + \gamma_{22}^{n+1} V_{(v, \alpha); n+1}(R, \beta_s)] - [\alpha_{22}^{n+1} V'_{(v, \alpha); n+1}(R, \beta_s) + \beta_{22}^{n+1} V_{(v, \alpha); n+1}(R, \beta_s)] \times \\ & \times [\delta_{22}^{n+1} V'_{(v, \alpha); n+1}(R, \beta_j) + \gamma_{22}^{n+1} V_{(v, \alpha); n+1}(R, \beta_j)] = (\alpha_{22}^{n+1} \gamma_{22}^{n+1} - \beta_{22}^{n+1} \delta_{22}^{n+1}) \times \\ & \times [V'_{(v, \alpha); n+1}(R, \beta_j) V_{(v, \alpha); n+1}(R, \beta_s) - V'_{(v, \alpha); n+1}(R, \beta_s) V_{(v, \alpha); n+1}(R, \beta_j)]. \end{aligned} \quad (2.52)$$

$$\text{Із тотожної рівності} \quad \tilde{\alpha}_{22}^{n+1} V'_{(v, \alpha); n+1}(R, \beta_j) + \tilde{\beta}_{22}^{n+1} V_{(v, \alpha); n+1}(R, \beta_j) = 0$$

випливає, що

$$\begin{aligned} & \tilde{\alpha}_{22}^{n+1} V'_{(v, \alpha); n+1}(R, \beta_j) + \tilde{\beta}_{22}^{n+1} V_{(v, \alpha); n+1}(R, \beta_j) = \\ & = \beta_j^2 \left[ \delta_{22}^{n+1} V'_{(v, \alpha); n+1}(R, \beta_j) + \gamma_{22}^{n+1} V_{(v, \alpha); n+1}(R, \beta_j) \right]. \end{aligned}$$

тому ліва частина рівності (2.52) рівна:

$$\begin{aligned} & [\alpha_{22}^{n+1} V'_{(v, \alpha); n+1}(R, \beta_j) + \beta_{22}^{n+1} V_{(v, \alpha); n+1}(R, \beta_j)] [\delta_{22}^{n+1} V'_{(v, \alpha); n+1}(R, \beta_s) + \\ & + \gamma_{22}^{n+1} V_{(v, \alpha); n+1}(R, \beta_s)] - [\alpha_{22}^{n+1} V'_{(v, \alpha); n+1}(R, \beta_s) + \beta_{22}^{n+1} V_{(v, \alpha); n+1}(R, \beta_s)] \times \\ & \times [\delta_{22}^{n+1} V'_{(v, \alpha); n+1}(R, \beta_j) + \gamma_{22}^{n+1} V_{(v, \alpha); n+1}(R, \beta_j)] = (\beta_j^2 - \beta_s^2) \times \\ & \times \left[ \delta_{22}^{n+1} V'_{(v, \alpha); n+1}(R, \beta_j) + \gamma_{22}^{n+1} V_{(v, \alpha); n+1}(R, \beta_j) \right] \times \\ & \times \left[ \delta_{22}^{n+1} V'_{(v, \alpha); n+1}(R, \beta_s) + \gamma_{22}^{n+1} V_{(v, \alpha); n+1}(R, \beta_s) \right]. \end{aligned} \quad (2.53)$$

Порівнюючи праві частини (2.52) і (2.53), одержуємо:

$$\begin{aligned} & V_{(v, \alpha); n+1}(R, \beta_j) V'_{(v, \alpha); n+1}(R, \beta_s) - V_{(v, \alpha); n+1}(R, \beta_s) V'_{(v, \alpha); n+1}(R, \beta_j) = \\ & = - \frac{\beta_j^2 - \beta_s^2}{\alpha_{22}^{n+1} \gamma_{22}^{n+1} - \beta_{22}^{n+1} \delta_{22}^{n+1}} \left[ \delta_{22}^{n+1} V'_{(v, \alpha); n+1}(R, \beta_j) + \gamma_{22}^{n+1} V_{(v, \alpha); n+1}(R, \beta_j) \right] \times \\ & \times \left[ \delta_{22}^{n+1} V'_{(v, \alpha); n+1}(R, \beta_s) + \gamma_{22}^{n+1} V_{(v, \alpha); n+1}(R, \beta_s) \right]. \end{aligned} \quad (2.54)$$

Із інтерфейсних умов на  $r = R_k$

$$\tilde{\alpha}_{j1}^k V'_{(v,\alpha);k} + \tilde{\beta}_{j1}^k V_{(v,\alpha);k} = \tilde{\alpha}_{j2}^k V'_{(v,\alpha);k+1} + \tilde{\beta}_{j2}^k V_{(v,\alpha);k+1}, \quad j = 1, 2.$$

знаходимо співвідношення

$$V_{(v,\alpha);k}(R_k, \beta_j) = -\frac{1}{c_{11,k}} \left[ \tilde{c}_{11,12}^{11,k} V'_{(v,\alpha);k+1}(R_k, \beta_j) + \tilde{c}_{11,12}^{12,k} V_{(v,\alpha);k+1}(R_k, \beta_j) \right],$$

$$V'_{(v,\alpha);k}(R_k, \beta_j) = -\frac{1}{c_{11,k}} \left[ \tilde{c}_{11,12}^{21,k} V'_{(v,\alpha);k+1}(R_k, \beta_j) + \tilde{c}_{11,12}^{22,k} V_{(v,\alpha);k+1}(R_k, \beta_j) \right]. \quad (2.55)$$

Ми врахували, що внаслідок рівностей (2.41) визначник системи (2.55)

$$\tilde{\alpha}_{11}^k \tilde{\beta}_{21}^k - \tilde{\alpha}_{21}^k \tilde{\beta}_{11}^k = c_{11,k} - \left( \tilde{c}_{11,12}^{12,k} - \tilde{c}_{11,12}^{21,k} \right) \beta^2 - c_{12,k} < 0.$$

Числа  $\tilde{c}_{11,12}^{ij,k}$ , які беруть участь в формулах (2.44), відповідно рівні:

$$\tilde{c}_{11,12}^{11,k} = \tilde{\alpha}_{11}^k \tilde{\alpha}_{22}^k - \tilde{\alpha}_{21}^k \tilde{\alpha}_{12}^k, \quad \tilde{c}_{11,12}^{12,k} = \tilde{\alpha}_{11}^k \tilde{\alpha}_{22}^k - \tilde{\alpha}_{21}^k \tilde{\alpha}_{12}^k;$$

$$\tilde{c}_{11,12}^{21,k} = \tilde{\beta}_{11}^k \tilde{\alpha}_{22}^k - \tilde{\beta}_{21}^k \tilde{\alpha}_{12}^k, \quad \tilde{c}_{11,12}^{22,k} = \tilde{\beta}_{11}^k \tilde{\beta}_{22}^k - \tilde{\beta}_{21}^k \tilde{\beta}_{12}^k.$$

Внаслідок рівностей (2.55) маємо:

$$V_{(v,\alpha);k}(R_k, \beta_j) V'_{(v,\alpha);k}(R_k, \beta_s) - V_{(v,\alpha);k}(R_k, \beta_s) V'_{(v,\alpha);k}(R_k, \beta_j) =$$

$$\frac{1}{c_{11,k}^2} \left\{ \left[ \tilde{c}_{11,12}^{11,k}(\beta_s) \tilde{c}_{11,12}^{21,k}(\beta_j) - \tilde{c}_{11,12}^{11,k}(\beta_j) \tilde{c}_{11,12}^{21,k}(\beta_s) \right] V'_{(v,\alpha);k+1}(R_k, \beta_s) + \right.$$

$$+ \left[ \tilde{c}_{11,12}^{12,k}(\beta_s) \tilde{c}_{11,12}^{22,k}(\beta_j) - \tilde{c}_{11,12}^{12,k}(\beta_j) \tilde{c}_{11,12}^{22,k}(\beta_s) \right] V_{(v,\alpha);k+1}(R_k, \beta_j) V_{(v,\alpha);k+1}(R_k, \beta_s) +$$

$$+ \left[ \tilde{c}_{11,12}^{11,k}(\beta_s) \tilde{c}_{11,12}^{22,k}(\beta_j) - \tilde{c}_{11,12}^{21,k}(\beta_s) \tilde{c}_{11,12}^{12,k}(\beta_s) \right] V_{(v,\alpha);k+1}(R_k, \beta_j) V'_{(v,\alpha);k+1}(R_k, \beta_s) -$$

$$\left. - \left[ \tilde{c}_{11,12}^{11,k}(\beta_j) \tilde{c}_{11,12}^{22,k}(\beta_s) - \tilde{c}_{11,12}^{21,k}(\beta_j) \tilde{c}_{11,12}^{12,k}(\beta_s) \right] V_{(v,\alpha);k+1}(R_k, \beta_s) V'_{(v,\alpha);k+1}(R_k, \beta_j) \right\}$$

На основі рівностей

$$\tilde{\alpha}_{11}^k(\beta_s) \tilde{\beta}_{11}^k(\beta_j) - \tilde{\alpha}_{11}^k(\beta_j) \tilde{\beta}_{11}^k(\beta_s) = -(\beta_j^2 - \beta_s^2) \alpha_{11}^k,$$

$$\tilde{\alpha}_{21}^k(\beta_s) \tilde{\beta}_{21}^k(\beta_j) - \tilde{\alpha}_{21}^k(\beta_j) \tilde{\beta}_{21}^k(\beta_s) = -(\beta_j^2 - \beta_s^2) \alpha_{22}^k,$$

$$\tilde{\alpha}_{21}^k(\beta_j) \tilde{\beta}_{11}^k(\beta_s) - \tilde{\alpha}_{11}^k(\beta_s) \tilde{\beta}_{21}^k(\beta_j) = c_{11,k} - a_{12}^k (\beta_j^2 - \beta_s^2),$$

$$a_{12}^k \equiv a_{12,1}^k \equiv a_{12,2}^k; \quad a_{12,1}^k = \delta_{11}^k \beta_{21}^k - \alpha_{21}^k \gamma_{11}^k; \quad a_{12,2}^k = \delta_{11}^k \beta_{21}^k - \alpha_{11}^k \gamma_{21}^k.$$

ВСТАНОВЛЮЄМО:

$$\begin{aligned}
& V_{(v,\alpha);k}(R_k, \beta_j) V'_{(v,\alpha);k}(R_k, \beta_s) - V_{(v,\alpha);k}(R_k, \beta_s) V'_{(v,\alpha);k}(R_k, \beta_j) = \\
& = -c_{11}^{-2} (\beta_j^2 - \beta_s^2) \{ a_{11}^k Z_{(v,\alpha);2k}(\beta_s) Z_{(v,\alpha);2k}(\beta_j) + a_{22}^k Z_{(v,\alpha);1k}(\beta_s) Z_{(v,\alpha);1k}(\beta_j) + \\
& + a_{12}^k Z_{(v,\alpha);2k}(\beta_s) Z_{(v,\alpha);1k}(\beta_j) + Z_{(v,\alpha);2k}(\beta_s) Z_{(v,\alpha);1k}(\beta_j) + c_{11,k} \times \\
& \times [\tilde{c}_{21,22}^{-11,k} V'_{(v,\alpha);k+1}(R_k, \beta_s) V'_{(v,\alpha);k+1}(R_k, \beta_j) + \tilde{c}_{21,22}^{-22,k} V_{(v,\alpha);k+1}(R_k, \beta_s) V_{(v,\alpha);k+1}(R_k, \beta_j) + \\
& + \tilde{c}_{21,22}^{-12,k} (V_{(v,\alpha);k+1}(R_k, \beta_j) V'_{(v,\alpha);k+1}(R_k, \beta_s) + V'_{(v,\alpha);k+1}(R_k, \beta_j) V_{(v,\alpha);k+1}(R_k, \beta_s)) \} + \\
& + c_{11,k} c_{21,k} \left[ V_{(v,\alpha);k+1}(R_k, \beta_j) V'_{(v,\alpha);k+1}(R_k, \beta_s) + V_{(v,\alpha);k+1}(R_k, \beta_s) V'_{(v,\alpha);k+1}(R_k, \beta_j) \right]
\end{aligned} \tag{2.56}$$

Оскільки внаслідок рівностей (2.41) випливає, що)

$$\left( a_{12}^k \right)^2 - a_{11}^k a_{22}^k \equiv a_{12,1}^k a_{12,2}^k - a_{11}^k a_{22}^k = -c_{11,k} c_{12,k} = -c_{11,k} \cdot 0 = 0$$

$$\left( c_{21,22}^{-12,k} \right)^2 - c_{21,22}^{-11,k} c_{21,22}^{-22,k} \equiv c_{21,22}^{12,k} c_{21,22}^{21,k} - c_{21,22}^{11,k} c_{21,22}^{22,k} = -c_{21,k} c_{22,k} = -c_{21,k} \cdot 0 = 0,$$

то вираз в фігурних дужках (2.56) набуває того вигляду, в якому він стоїть у формулі (2.48). Підставимо (2.54) і (2.56) в (2.51). Оскільки

$$R_k^{2\alpha_k+1} a_k^2 \sigma_k \frac{c_{21,k}}{c_{11,k}} - a_{k+1}^2 \sigma_{k+1} R_k^{2\alpha_{k+1}+1} = 0,$$

то після скорочення на  $(\beta_j^2 - \beta_s^2) \neq 0$  одержуємо:

$$\sum_{k=1}^{n+1} \int_{R_{k-1}}^{R_k} V_{(v,\alpha);k}(r, \beta_j) V_{(v,\alpha);k}(r, \beta_s) r^{2\alpha_k+1} \sigma_k dr = -G_{(v,\alpha);n}(\beta_j, \beta_s). \tag{2.57}$$

Якщо врахувати, що

$$\begin{aligned}
& \sum_{k=1}^{n+1} \int_{R_{k-1}}^{R_k} V_{(v,\alpha);k}(r, \beta_j) V_{(v,\alpha);k}(r, \beta_s) r^{2\alpha_k+1} \sigma_k dr = \\
& = \int_0^R V_{(v,\alpha)}(r, \beta_j) V_{(v,\alpha)}(r, \beta_s) \sigma(r) dr \equiv (V_{(v,\alpha)}(r, \beta_j), V_{(v,\alpha)}(r, \beta_s)),
\end{aligned}$$

то рівність (2.57) показує: для  $\beta_j \neq \beta_s$   $(V_{(v,\alpha)}(r, \beta_j) V_{(v,\alpha)}(r, \beta_s))_1 = 0$ .

Остання рівність означає, що система  $\left\{V_{(v,\alpha)}(r, \beta_j)\right\}_{j=1}^{\infty}$  узагальнено ортогональна. При  $\beta_j = \beta_s$  отримуємо квадрат норми власної вектор – функції:

$$\begin{aligned} \left\|V_{(v,\alpha)}(r, \beta_j)\right\|_1^2 &= \left\|V_{(v,\alpha)}(r, \beta_j)\right\|^2 + G_{(v,\alpha);n}(\beta_j, \beta_j) \equiv \\ &\equiv \int_0^R \left[V_{(v,\alpha)}(r, \beta_j)\right]^2 \sigma(r) dr + G_{(v,\alpha);n}(\beta_j, \beta_j). \end{aligned} \quad (2.58)$$

Наявність дискретної функції  $\left\{V_{(v,\alpha)}(r, \beta_j)\right\}_{j=1}^{\infty}$  дозволяє ставити питання про розвинення вектор – функції  $g(r)$  в ряд Фур’є за цією системою.

**Теорема 2.2.3** (типу теореми Стеклова): *Якщо вектор – функція  $q(r) \in C^{(3)}(I_n)$ , задовольняє крайові умови (2.39) та системі інтерфейсних умов (2.40), то вона зображається абсолютно й рівномірно збіжним на кожній компактній множині  $I_n^* \subset I_n$  рядом Фур’є:*

$$g(r) = \sum_{j=1}^{\infty} \int_0^{R_{n+1}} q(\rho) V_{(v,\alpha)}(\rho, \beta_j) \sigma(\rho) d\rho \frac{V_{(v,\alpha)}(r, \beta_j)}{\left\|V_{(v,\alpha)}(r, \beta_j)\right\|_1^2}. \quad (2.59)$$

**Доведення:** Доведення теореми проводиться за логічною схемою т. 1.2.3 згідно підходів поданих в працях [97, 131].

Ряд Фур’є (2.59) визначає пряме  $H_{(v,\alpha);n}$  і обернене  $H_{(v,\alpha);n}^1$  гібридне скінчене інтегральне перетворення типу Ганкеля 1 – го роду з спектральним параметром для обчислення  $n$ -складового неоднорідного циліндричного середовища:

$$\begin{aligned} H_{(v,\alpha);n}[q(r)] &= \int_0^{R_{n+1}} q(r) V_{(v,\alpha)}(r, \beta_j) \sigma(r) dr = \\ &= \sum_{k=1}^{n+1} \int_{R_{k-1}}^{R_k} q_k(r) V_{(v,\alpha);k}(r, \beta_j) \sigma_k r^{2\alpha_k+1} dr \equiv q_j, \end{aligned} \quad (2.60)$$

$$H_{(v,\alpha);n}^1 [g_j] = \sum_{j=1}^{\infty} g_j \frac{V_{(v,\alpha)}(r, \beta_j)}{\|V_{(v,\alpha)}(r, \beta_j)\|_1^2} \equiv g(r). \quad (2.61)$$

Застосування запровадженого формулами (2.60), (2.61) скінченного інтегрального перетворення для розв'язування відповідних задач математичного моделювання масопереносу базується на основній тотожності інтегрального перетворення гібридного диференціального оператора Бесселя  $B_{(v,\alpha)}$ .

**Теорема 3.2.4 (про основну тотожність).** Якщо вектор – функція  $q(r) \in C^{(3)}(I_n)$ , задовольняє крайові умови

$$\lim_{r \rightarrow 0} r^{\alpha_1+1} \left( g_1(r) V_{(v,\alpha);1}(r, \beta_j) - g_1'(r) V'_{(v,\alpha);1}(r, \beta_j) \right) = 0$$

$$\left( \tilde{\alpha}_{22}^{n+1} \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{22}^{n+1} \right) g_{n+1}(r) \Big|_{r=R} = \omega_{n+1} \quad ; \quad (2.62)$$

та системі інтерфейсних умов

$$\left[ \left( \tilde{\alpha}_{j1}^k \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{j1}^k \right) g_k(r) - \left( \tilde{\alpha}_{j2}^k \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{j2}^k \right) g_{n+1}(r) \right] \Big|_{r=R_k} = \omega_{jk}; \quad j = 1, 2; k = \overline{1, n}. \quad (2.63)$$

то справджується основна тотожність інтегрального перетворення диференціального оператора  $B_{(v,\alpha)}$ :

$$H_{(v,\alpha);n} [B_{(v,\alpha)}[g(r)]] = -\beta_j^2 g_j \sum_{m=1}^{k+1} k_m^2 \int_{R_{m-1}}^{R_m} g_m(r) V_{(v,\alpha);m}(r, \beta_j) \sigma_m r^{2\alpha_m+1} dr +$$

$$+ \frac{\omega_{n+1} R_{n+1}^{(2\alpha_{n+1})+1}}{\alpha_{22}^{n+1} \gamma_{22}^{n+1} - \beta_{22}^{n+1} \delta_{22}^{n+1}} \left[ \delta_{22}^{n+1} V'_{(v,\alpha);n+1}(R_{n+1}, \beta_j) + \gamma_{22}^{n+1} V_{(v,\alpha);n+1}(R_{n+1}, \beta_j) \right] +$$

$$+ \sum_{k=1}^n c_{11,k}^{-1} a_k^2 \sigma_k^{2\alpha_k+1} \left[ \tilde{\alpha}_{12}^k V'_{(v,\alpha);k+1}(R_k, \beta_j) + \tilde{\beta}_{j1}^k V_{(v,\alpha);k+1}(R_k, \beta_j) \omega_{2k} - \right.$$

$$\left. - \left( \tilde{\alpha}_{22}^k V'_{(v,\alpha);k+1}(R_k, \beta_j) + \tilde{\beta}_{22}^k V_{(v,\alpha);k+1}(R_k, \beta_j) \omega_{1k} \right) \right]. \quad (2.64)$$

**Доведення:** Із системи інтерфейсних умов одержуємо базову тотожність

$$\begin{aligned}
 & V_{(v,\alpha);k} \left( R_k, \beta_j \right) g'_k \left( R_k \right) - V'_{(v,\alpha);k} \left( R_k, \beta_j \right) g_k \left( R_k \right) = \\
 & = \frac{c_{21,k}}{c_{11,k}} \left( V_{(v,\alpha);k+1} \left( R_k, \beta_j \right) g'_k \left( R_k \right) - V'_{(v,\alpha);k+1} \left( R_k, \beta_j \right) q_{k+1} \left( R_k \right) \right) + \\
 & + \frac{1}{c_{11,k}} \left[ \left( \tilde{\alpha}_{12}^k \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{12}^k \right) V_{(v,\alpha);k+1} \left( r, \beta_n \right) \Big|_{r=R_k} \omega_{2k} - \left( \tilde{\alpha}_{22}^k \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{22}^k \right) V_{(v,\alpha);k+1} \left( r, \beta_n \right) \Big|_{r=R_k} \omega_{1k} \right].
 \end{aligned} \tag{2.65}$$

Проінтегруємо два рази частинами:

$$\begin{aligned}
 & H_{(v,\alpha);n} \left[ B_{(v,\alpha)} \left[ g(r) \right] \right] \equiv \sum_{m=1}^{n+1} \int_{R_{m-1}}^{R_m} D_m B_{v_m, \alpha_m} \left[ g_m \right] V_{(v,\alpha);m} \left( r, \beta_j \right) \sigma_m r^{2\alpha_m+1} dr = \\
 & = -D_1 \cdot \sigma_1 \lim_{r \rightarrow 0} r^{2\alpha_1+1} \left( g'_1(r) V_{(v,\alpha);1} \left( r, \beta_j \right) - g_1(r) V'_{(v,\alpha);1} \left( r, \beta_j \right) \right) + \\
 & + D_{n+1} \sigma_{n+1} R_{n+1}^{2\alpha_{n+1}+1} \left( g'_{n+1}(r) V_{(v,\alpha);n+1} \left( r, \beta_j \right) - g_{n+1}(r) V'_{(v,\alpha);n+1} \left( r, \beta_j \right) \right) \Big|_{r=R_{n+1}} + \\
 & + \sum_{k=1}^n \left[ D_k \cdot \sigma_k R_k^{2\alpha_k+1} \left( g'_k \left( R_k \right) \cdot V_{(v,\alpha);k} \left( R_k, \beta_j \right) - g_k \left( R_k \right) V'_{(v,\alpha);k} \left( R_k, \beta_j \right) \right) - \right. \\
 & \left. - D_{k+1} \sigma_{k+1} R_k^{2\alpha_{k+1}+1} \left( g'_{k+1} \left( R_k \right) V_{(v,\alpha);k+1} \left( R_k, \beta_j \right) - g_{k+1} \left( R_k \right) V'_{(v,\alpha);k+1} \left( R_k, \beta_j \right) \right) \right] + \\
 & + \sum_{m=1}^{n+1} D_m \int_{R_{m-1}}^{R_m} g_m(r) B_{v_m, \alpha_m} \left[ V_{(v,\alpha);m} \left( r, \beta_j \right) \right] \sigma_m r^{2\alpha_m+1} dr.
 \end{aligned} \tag{2.66}$$

Безпосередньо маємо:

$$D_m \cdot B_{v_m, \alpha_m} \left[ V_{(v,\alpha);m} \left( r, \beta_j \right) \right] = - \left( \beta_j^2 + k_m^2 \right) V_{(v,\alpha);m} \left( r, \beta_j \right) \tag{2.67}$$

$$\begin{aligned}
 & g'_{n+1} \left( R \right) \cdot V_{(v,\alpha);n+1} \left( R, \beta_j \right) - g_{n+1} \left( R \right) \cdot V'_{(v,\alpha);n+1} \left( R, \beta_j \right) = \frac{1}{\tilde{\alpha}_{22}^{n+1}} \left[ \tilde{\alpha}_{22}^{n+1} g'_{n+1} \left( R \right) + \right. \\
 & + \tilde{\beta}_{22}^{n+1} g_{n+1} \left( R \right) \cdot V_{(v,\alpha);n+1} \left( R, \beta_j \right) - g_{n+1} \left( R \right) \cdot \left( \tilde{\alpha}_{22}^{n+1} V'_{(v,\alpha);n+1} \left( R, \beta_j \right) + \right. \\
 & + \tilde{\beta}_{22}^n V_{(v,\alpha);n+1} \left( R, \beta_j \right) \left. \right] = \omega_{n+1} \left( \tilde{\alpha}_{22}^{n+1} \right)^{-1} V_{(v,\alpha);n+1} \left( R, \beta_j \right) \equiv \omega_{n+1} \left( \alpha_{22}^{n+1} \gamma_{22}^{n+1} - \right. \\
 & \left. - \beta_{22}^{n+1} \delta_{22}^{n+1} \right)^{-1} \left[ \delta_{22}^{n+1} V'_{(v,\alpha);n+1} \left( R_{n+1}, \beta_j \right) + \gamma_{22}^{n+1} V_{(v,\alpha);n+1} \left( R_{n+1}, \beta_j \right) \right]
 \end{aligned} \tag{2.68}$$

Якщо в (2.66) підставити (2.67), (2.68), (2.65) і скористатися структурою  $\sigma_k$ , то приходимо до (2.64).

Логічну схему застосування запровадженого скінченного інтегрального перетворення типу Ганкеля 1 – го роду із спектральним параметром покажемо на прикладах побудови точних аналітичних розв'язків математичних моделей



масопереносу з врахуванням швидкостей зміни градієнтів концентрацій на краю і масообмінних поверхнях  $r = R_j, j = 1, n$ .

**Задача квазістатисти:** Побудувати обмежений в області

$$D_n^+ = \left\{ (t, r) : t \in (0; \infty), r \in i_n = \bigcup_{m=1}^{n+1} (R_{m-1}, R_m); R_0 = 0, R_{n+1} \equiv R < \infty \right\}$$

розв'язок системи  $B$  – параболічних рівнянь масопереносу для обмеженого осесиметричного  $n$ -складового неоднорідного (по координаті  $r$ ) середовища .

$$\frac{\partial u_m}{\partial t} + \gamma_m^2 u_m - D_m B_{\nu_m, \alpha_m} [u_m] = f_m(t, r), r \in (R_{m-1}, R_m) \quad (2.69)$$

за початковими умовами

$$u_m(t, r)|_{t=0} = g_m(r), r \in (R_{m-1}, R_m); m = \overline{1, n+1}, R_0 = 0 \quad (2.70)$$

крайовими умовами

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial r} (r^{\alpha_1 - \nu_1} u_1) = 0, (L_{22}^{n+1} [u_{n+1}(t, r)])|_{r=R_{n+1}} = \omega_{n+1}(t) \quad (2.71)$$

та системою  $n$ -інтерфейсних умов

$$(L_{j1}^k [u_k(t, r)] - L_{j2}^k [u_{k+1}(t, r)])|_{r=R_k} = \omega_{jk}(t); j = 1, 2; k = \overline{1, n}. \quad (2.72)$$

**Розв'язання:** Припустимо, що  $\max\{\gamma_1^2; \gamma_2^2; \dots; \gamma_n^2; \gamma_{n+1}^2\} = \gamma_1^2$ . Покладемо

$k_m^2 = \gamma_1^2 - \gamma_m^2 \geq 0, m = \overline{1, n+1}$ . Якщо ввести до розгляду функції

$$u(t, r) = \sum_{m=1}^{n+1} \Theta(r - R_{m-1}) \Theta(R_m - r) u_m(t, r),$$

$$g(r) = \sum_{m=1}^{n+1} \Theta(r - R_{m-1}) \Theta(R_m - r) q_m(r);$$

$$f(t, r) = \sum_{m=1}^{n+1} \Theta(r - R_{m-1}) \Theta(R_m - r) f_m(t, r); \gamma^2 = \sum_{m=1}^{n+1} \Theta(r - R_{m-1}) \Theta(R_m - r) \gamma_m^2,$$

то система (2.69) й початкові умови (2.70) набувають вигляду задачі Коші:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \gamma^2 u - B_{(\nu, \alpha)} [u] = f(t, r); u|_{t=0} = g(r). \quad (2.73)$$

Застосуємо до задачі (2.73) інтегральний оператор  $H_{(v,\alpha);n}$  за правилом (2.60). Внаслідок тотожності (2.64) одержуємо задачу Коші для звичайного диференціального рівняння 1 – го порядку

$$\left( \frac{d}{dt} + \beta_j^2 + \gamma_1^2 \right) u_j(t) F_j(t), u_j(t) \Big|_{t=0} = g_j. \quad (2.74)$$

Тут

$$\begin{aligned} F_j(t) = & f_j(t) + R_{n+1}^{2\alpha_{n+1}+1} \left( \alpha_{22}^{n+1} \gamma_{22}^{n+1} - \beta_{22}^{n+1} \delta_{22}^{n+1} \right)^{-1} \left( \delta_{22}^{n+1} V'_{(v,\alpha);n+1} (R_{n+1}, \beta_j) + \right. \\ & \left. + \gamma_{22}^{n+1} V_{(v,\alpha);n+1} (R_{n+1}, \beta_j) \right) (\omega_{n+1}(t) + \Psi_{n+1} \cdot \delta_+(t)) + \\ & + \sum_{k=1}^n \frac{D_k \sigma_k}{c_{11,k}} R_k^{2\alpha_k+1} \left[ \left( \tilde{\alpha}_{12}^k \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{12}^k \right) V_{(v,\alpha);k+1} (r, \beta_j) \Big|_{r=R_k} (\omega_{2k}(t) + \Psi_{2k} \cdot \delta_+(t)) - \right. \\ & \left. - \left( \tilde{\alpha}_{22}^k \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{22}^k \right) V_{(v,\alpha);k+1} (r, \beta_j) \Big|_{r=R_k} (\omega_{1k}(t) + \Psi_{1k} \delta_+(t)) \right]; \\ \Psi_{n+1} = & \delta_{22}^{n+1} g'_{n+1}(R_{n+1}) + \gamma_{22}^{n+1} g_{n+1}(R_{n+1}); \Psi_{jk} = \delta_{j1}^k g'_k(R_k) + \gamma_{j1}^k q_k(R_k) - \\ & - \delta_{j2}^k g'_{k+1}(R_k) - \gamma_{j2}^k g_{k+1}(R_k); j = 1, 2, k = \overline{1, n}. \end{aligned}$$

Безпосередньо перевіряється, що розв'язком задачі Коші (2.74) є функція

$$u_j(t) = e^{-(\beta_j^2 + \gamma_1^2)t} g_j + \int_0^t e^{-(\beta_j^2 + \gamma_1^2)(t-\tau)} F_j(\tau) d\tau \equiv \int_0^t e^{-(\beta_j^2 + \gamma_1^2)(t-\tau)} [F_j(\tau) + g_j \cdot \delta_+(\tau)] d\tau. \quad (2.75)$$

У результаті застосування до функції  $u_j(t)$ , визначеної формулою (2.71), оператора  $H_{(v,\alpha);n}^{-1}$  за правилом (2.52) одержуємо функції

$$\begin{aligned} u_i(t, r) = & \sum_{k=1}^{n+1} \int_0^t \int_{R_{k-1}}^{R_k} H_{(v,\alpha);jk} (t-\tau, r, \rho) [f_k(\tau, \rho) + g_k(\rho) \delta_+(\tau)] \sigma_k \rho^{2\alpha_k+1} d\rho d\tau + \\ & + \int_0^t W_{(v,\alpha);n+1,i} (t-\tau, r) [\omega_{n+1}(\tau) + \psi_{n+1} \delta_+(\tau)] d\tau + \sum_{k=1}^n \int_0^t [R_{(v,\alpha);jk}^{(1)} (t-\tau, r) (\omega_{1k}(\tau) + \psi_{1k} \delta_+(\tau)) + \\ & + R_{(v,\alpha);jk}^{(2)} (t-\tau, r) (\omega_{2k}(\tau) + \psi_{2k} \delta_+(\tau))] d\tau, i = \overline{1, n+1} \end{aligned} \quad (2.76)$$

які повністю описують єдиний розв'язок крайової задачі масопереносу (2.69) – (2.72).

Тут головні розв'язки даної параболічної крайової задачі:

а) матриця функції впливу , породжених неоднорідністю системи і початкових умов:

$$H_{(v,\alpha);jk}(t,r,\rho) = \sum_{j=1}^{\infty} e^{-(\beta_j^2 + \gamma_1^2)t} \frac{V_{(v,\alpha);i}(r, \beta_j) V_{(v,\alpha);k}(\rho, \beta_j)}{\|V_{(v,\alpha)}(r, \beta_j)\|_1^2}; j, k = \overline{1, n+1}$$

б) вектор функції Гріна, породжені впливом масообміну на крайовій поверхні  $r = R_{n+1} \equiv R$ ;

$$W_{(v,\alpha);n+1,i}(t,r) = \sum_{j=1}^{\infty} e^{-(\beta_j^2 + \gamma_1^2)t} [R_{n+1}^{2\alpha_{n+1}+1} (\alpha_{22}^{n+1} \gamma_{22}^{n+1} - \beta_{22}^{n+1} \delta_{22}^{n+1})^{-1} \times \\ \times (\delta_{22}^{n+1} V'_{(v,\alpha);n+1}(R_{n+1}, \beta_j) + \gamma_{22}^{n+1} V_{(v,\alpha);n+1}(R_{n+1}, \beta_j))] \frac{V_{(v,\alpha);i}(r, \beta_j)}{\|V_{(v,\alpha)}(r, \beta_j)\|_1^2}; i = \overline{1, n+1}$$

в) матриці функцій Гріна впливу системи  $n$ -інтерфейсних умов:

$$R_{(v,\alpha);jk}^{(1)}(t,r) = -\frac{D_k \sigma_k}{c_{11,k}} R_k^{2\alpha_k+1} \sum_{j=1}^{\infty} e^{-(\beta_j^2 + \gamma_1^2)t} \left[ \left( \tilde{\alpha}_{22}^k \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{22}^k \right) V_{(v,\alpha);k+1}(r, \beta_j) \Big|_{r=R_k} \right] \times \\ \times V_{(v,\alpha);i}(r, \beta_j) \left( \|V_{(v,\alpha)}(r, \beta_j)\|_1^2 \right)^{-1}, \\ R_{(v,\alpha);jk}^{(2)}(t,r) = -\frac{D_k \sigma_k}{c_{11,k}} R_k^{2\alpha_k+1} \sum_{j=1}^{\infty} e^{-(\beta_j^2 + \gamma_1^2)t} \left[ \left( \tilde{\alpha}_{12}^k \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{12}^k \right) V_{(v,\alpha);k+1}(r, \beta_j) \Big|_{r=R_k} \right] \times \\ \times V_{(v,\alpha);i}(r, \beta_j) \left( \|V_{(v,\alpha)}(r, \beta_j)\|_1^2 \right)^{-1}, i = \overline{1, n+1}$$

**Динамічна модель:** Побудувати обмежений в області  $D_n^+$  розв'язок системи В-гіперболічних рівнянь масопереносу для обмеженого циліндричного  $n$ -складового кусково-однорідного середовища

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} u_m + \gamma_m^2 u_m - D_m B_{v_m, \alpha_m} [u_m] = f_m(t, r), \quad r \in (R_{m-1}, R_m) \quad (2.77)$$

за початковими умовами

$$u_m(t, r) \Big|_{t=0} = g_{m1}(r), \quad \frac{\partial u_m(t, r)}{\partial t} \Big|_{t=0} = g_{m2}(r), \quad r \in (R_{m-1}, R_m) \quad (2.78)$$

крайовими умовами

$$\lim_{r \rightarrow 0} \left[ \frac{\partial}{\partial r} (r^{\alpha_1 - \nu_1} u_1(t, r)) \right] = 0; \quad \left( \Theta_{22}^{n+1} [u_{n+1}(t, r)] \right) \Big|_{r=R_{n+1}} = \omega_{n+1}(t) \quad (2.79)$$

та інтерфейсними умовами масообміну

$$\left( \Theta_{j1}^k [u_k(t, r)] - \Theta_{j2}^k [u_{k+1}(t, r)] \right) \Big|_{r=R_k} = \omega_{jk}(t); \quad j = 1, 2; k = \overline{1, n}. \quad (2.80)$$

У результаті застосування до задачі (2.77)-(2.80) інтегрального оператора  $H_{(v, \alpha); n}$  (2.60) та внаслідок тотожності (2.64) одержуємо задачу Коші:

$$\left( \frac{d^2}{dt^2} + \beta_j^2 + \gamma_1^2 \right) u_j(t) = F_j(t), \quad u_j(t) \Big|_{t=0} = g_{1j}, \quad \frac{\partial u_j}{\partial t} \Big|_{t=0} = g_{2j}. \quad (2.81)$$

Розв'язком задачі Коші (2.81) є функція

$$u_j(t) = \frac{\sin \sqrt{\beta_j^2 + \gamma_1^2} t}{\sqrt{\beta_j^2 + \gamma_1^2}} g_{2j} + \frac{d}{dt} \left( \frac{\sin \sqrt{\beta_j^2 + \gamma_1^2} t}{\sqrt{\beta_j^2 + \gamma_1^2}} \right) g_{1j} + \int_0^t \frac{\sin \sqrt{\beta_j^2 + \gamma_1^2} (t - \tau)}{\sqrt{\beta_j^2 + \gamma_1^2}} F_j(\tau) d\tau. \quad (2.82)$$

Тут

$$\begin{aligned} F_j(t) = & f_j(t) + R_{n+1}^{2\alpha_{n+1}+1} \left( \alpha_{22}^{n+1} \gamma_{22}^{n+1} - \beta_{22}^{n+1} \delta_{22}^{n+1} \right)^{-1} \left( \delta_{22}^{n+1} V'_{(v, \alpha); n+1} (R, \beta_j) + \right. \\ & \left. + \gamma_{22}^{n+1} V_{(v, \alpha); n+1} (R, \beta_j) \right) (\omega_{n+1}(t) + \Psi_{n+1,1} \delta_+''(t) + \Psi_{n+1,2} \delta_+(t)) + \\ & + \sum_{k=1}^n \frac{D_k \sigma_k}{c_{11,k}} R_k^{2\alpha_k+1} \left[ \left( \tilde{\alpha}_{12}^k V'_{(v, \alpha); k+1} (R_k, \beta_j) + \tilde{\beta}_{12}^k V_{(v, \alpha); k+1} (R_k, \beta_j) \right) \cdot (\omega_{2k}(t) + \Psi_{2k,1} \delta_+''(t) + \Psi_{2k,2} \delta_+(t)) - \right. \\ & \left. - \left( \tilde{\alpha}_{22}^k V'_{(v, \alpha); k+1} (R_k, \beta_j) + \tilde{\beta}_{22}^k V_{(v, \alpha); k+1} (R_k, \beta_j) \right) (\omega_{1k}(t) + \Psi_{1k,1} \delta_+''(t) + \Psi_{1k,2} \delta_+(t)) \right]; \\ \Psi_{jk,i} = & \delta_{j1}^k g'_{ki}(R_k) + \gamma_{j1}^k g_{ki}(R_k) - \delta_{j2}^k g'_{k+1,i}(R_k) - \gamma_{j2}^k g_{k+1,i}(R_k). \quad \Psi_{n+1,i} = \delta_{22}^{n+1} g'_{n+1,i}(R_{n+1}) + \gamma_{22}^{n+1} g_{n+1,i}(R_{n+1}), \quad i = 1, 2; \end{aligned}$$

У результаті застосування до функції  $u_j(t)$ , визначеної формулою (2.82)

оператора  $H_{(v, \alpha); n}^{(-1)}$  (2.61) отримуємо функції

$$u_i(t, r) = \sum_{m=1}^{n+1} \int_0^t \int_{R_{m-1}}^{R_m} H_{(v, \alpha); jm}^{(-1)}(t - \tau, r, \rho) \left[ f_m(\tau, \rho) + q_{m2}(\rho) \delta_+(\tau) \right] \sigma_m \rho^{2\alpha_m+1} d\rho d\tau +$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{\partial}{\partial t} \sum_{m=1}^{n+1} \int_{R_{m-1}}^{R_m} H_{(v,\alpha);jm}(t,r,\rho) g_{m1}(\rho) \sigma_m \rho^{2\alpha_{m+1}} d\rho + \int_0^t W_{(v,\alpha);n+1,i}(t-\tau,r) [\omega_{n+1}(\tau) + \Psi_{n+1,1} \delta_+''(\tau) + \Psi_{n+1,2} \delta_+(\tau)] d\tau + \\
& + \sum_{k=1}^n \int_0^t [R_{(v,\alpha);jk}^{(1)}(t-\tau,r) (\omega_{1k}(\tau) + \psi_{1k,1} \delta_+''(\tau) + \Psi_{1k,2} \delta_+(\tau)) + \\
& + R_{(v,\alpha);jk}^{(2)}(t-\tau,r) (\omega_{2k}(\tau) + \psi_{2k,1} \delta_+''(\tau) + \Psi_{2k,2} \delta_+(\tau))] d\tau, i = \overline{1, n+1},
\end{aligned} \tag{2.83}$$

які повністю визначають єдиний розв'язок гіперболічної задачі масопереносу (2.77) – (2.80).

Тут головні розв'язки гіперболічної задачі крайової задачі:

а) матриця функції впливу, породжених неоднорідністю системи та початкових умов

$$H_{(v,\alpha);im}(t,r,\rho) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\sin \sqrt{\beta_j^2 + \gamma_1^2} t V_{(v,\alpha);i}(r, \beta_j) V_{(v,\alpha);m}(\rho, \beta_j)}{\sqrt{\beta_j^2 + \gamma_1^2} \|V_{(v,\alpha)}(r, \beta_j)\|_1^2}; i, m = \overline{1, n+1}.$$

б) вектор функцій Гріна впливу масообміну на на межі  $r = R \equiv R_{n+1}$

$$\begin{aligned}
W_{(v,\alpha);n+1,i}(t,r) &= \frac{R_{n+1}^{2\alpha_{n+1}+1}}{\alpha_{22}^{n+1} \gamma_{22}^{n+1} - \beta_{22}^{n+1} \delta_{22}^{n+1}} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\sin \sqrt{\beta_j^2 + \gamma_1^2} t}{\sqrt{\beta_j^2 + \gamma_1^2}} \cdot (\delta_{22}^{n+1} V'_{(v,\alpha);n+1}(R_{n+1}, \beta_j) + \\
& + \gamma_{22}^{n+1} V_{(v,\alpha);n+1}(R_{n+1}, \beta_j)) \frac{V_{(v,\alpha);i}(r, \beta_j)}{\|V_{(v,\alpha)}(r, \beta_j)\|_1^2}; i = \overline{1, n+1}
\end{aligned}$$

в) матриці функції Гріна впливу системи  $n$ - інтерфейсних умов масообміну

$$R_{(v,\alpha);jk}^{(1)}(t,r) = -\frac{D_k \sigma_k}{c_{11,k}} R_k^{2\alpha_k+1} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\sin \sqrt{\beta_j^2 + \gamma_1^2} t}{\sqrt{\beta_j^2 + \gamma_1^2}} (\tilde{\alpha}_{22}^k V'_{(v,\alpha);k+1}(R_k, \beta_j) +$$

$$+ \tilde{\beta}_{22}^k V_{(v,\alpha);k+1}(R_k, \beta_j)) V_{(v,\alpha);i}(r, \beta_j) \left( \|V_{(v,\alpha)}(r, \beta_j)\|_1^2 \right)^{-1}, i = \overline{1, n+1};$$

$$R_{(v,\alpha);jk}^{(2)}(t,r) = -\frac{D_k \sigma_k}{c_{11,k}} R_k^{2\alpha_k+1} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\sin \sqrt{\beta_j^2 + \gamma_1^2} t}{\sqrt{\beta_j^2 + \gamma_1^2}} (\tilde{\alpha}_{12}^k V'_{(v,\alpha);k+1}(R_k, \beta_j) + \tilde{\beta}_{12}^k V_{(v,\alpha);k+1}(R_k, \beta_j)) V_{(v,\alpha);i}(r, \beta_j) \left( \|V_{(v,\alpha)}(r, \beta_j)\|_1^2 \right)^{-1}.$$

### РОЗДІЛ 3.

## ОСНОВИ МЕТОДОЛОГІЇ МОДЕЛЮВАННЯ ДИФУЗІЙНОГО ПЕРЕНЕСЕННЯ В БАГАТОШАРОВИХ НАНОПЛІВКАХ

У цьому розділі розроблено математичні моделі переносу для середовищ, описаних в попередньому розділі та побудовано їх розв'язки. Результати опубліковані в роботах [4, 72, 129-132] та апробовані на конференціях [6, 71, 133, 134, 139–141]. Властивості багатоконпонентних середовищ різної конфігурації буде визначати перенос вздовж товщини, який в свою чергу визначається багатоконпонентною структурою. Зокрема, розглянуто постановки крайових задач математичних моделей багатоскладового перенесення та викладено алгоритмічні схеми побудови їх розв'язку на основі застосування інтегральних перетворень Фур'є, Фур'є-Бесселя, Конторовича-Лебедева.

### 3.1. Структура багат шарових магнітних середовищ.

Багат шарові (багатоскладові) магнітні середовища є результат досліджень та розробок сучасної нанотехнологій і представляють собою композитні утворення тонких та дуже тонких шарів (наношарів або плівок), утворені з різних речовин, що мають різні фізико-хімічними властивості. Використовуючи різні нанотехнології нанесення тонких покриттів, зокрема такого як високотемпературне стаціонарне електромагнітне напилення, можна отримати багат шарові мультикомполитні наносередовища різної конфігурації (плоскі багат шарові пластини, багат шарові циліндри, сферичні та напівсферичні композити, конічні багаткомполитні голки тощо). Кожен із тонких шарів таких композитів володіє різними властивостями, врахування яких в сукупності приводить до різних нових фізичних ефектів (велика намагнічуваність, дифузійні ефекти тощо), як було підтверджено аналізом наноекспериментів, проведених в п.1.1. Важливими для практичних застосувань є багат шарові мультикомполити, побудовані з почерговим

нарощуванням шарів з двох різних матеріалів, що мають зовсім протилежні фізичні властивості (наприклад, феромагнетик-рідкоземельний метал). Саме такого типу і послідовності чергувань двох, іноді і більше тонких шарів в таких наномультікомполітатах і приводить до виявлення означених вище фізичних ефектів [200-204].

Інтенсивність прояву цих ефектів, можливість їх технологічного застосування в значній мірі визначається особливістю конструкції таких нанокомпозитів, зокрема кількістю шарів, товщиною та концентрацією дифундованої речовини, що перенесена в результаті дифузії із двох сусідніх шарів. При конструюванні таких нанокомпозитів важливу роль відіграє визначення оптимальних співвідношень між розмірами шарів з урахуванням впливу залишкових ефектів взаємодифузії, що виникають на межах контактів між цими шарами, спричинюючи в цілому багатоінтерфейсну взаємодію між усіма елементами (шарами) такої системи та взаємопроникнення атомів (молекул) в суміжні шари. Визначення оптимальних співвідношень взаємопроникнень дифундованих речовин у суміжні шари є також визначальним чинником конструювання мультікомполітів з наперед заданими властивостями.

Узагальнивши проаналізовані результати експериментальних та теоретичних досліджень по створенню мультинанокомпозитів, що володіють новими фізичними ефектами з метою визначення можливих шляхів їх практичного застосування та технологій промислового виготовлення, оцінки їх технологічних та конструктивних параметрів, нами запропоновані деякі конструктивні схеми опису таких наномультікомполітів. Дані конструктивні схеми надалі будуть розглядатися нами як математичні області для визначення моделей, що будуть описувати перенос в різних мультікомполітатах. (Фактор необмеженості та обмеженості середовищ враховує специфіку їх застосування для апарату створення математичних моделей переносу, їх дослідження та побудови розв'язку).

Декартові плоскі (одновимірні)  $n$ -складові середовища нами розглядаються у вигляді конструктивних схем, які подані на рис. 3.1-1.27.

На рис 3.1 зображено обмежене декартове плоске середовище

$I_n = \left\{ z : z \in \bigcup_{i=1}^{n+1} (l_{i-1}, l_i); 0 < l_0 < l_{n+1} < \infty \right\}$ , що складається з  $n$  шарів  $(l_{i-1}, l_i)$ , кожен з яких характеризується коефіцієнтом дифузії  $D_i$  та концентрацією  $C_i$ .

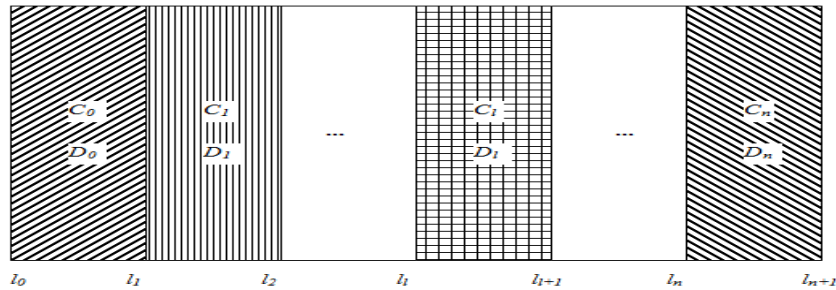


Рис.3.1. Декартове обмежене  $n$ -складове середовище

З метою подальшого вивчення симетричних середовищ розглянемо частковий випадок, коли  $l_0 = 0$  (див. рис.3.2.)

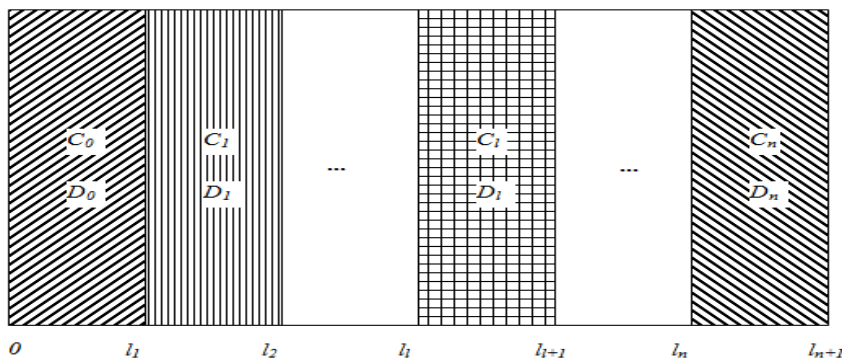


Рис.3.2. Декартове обмежене симетричне  $n$ -складове середовище

Розглядаються також різні види необмежених середовищ, тобто таких, в яких товщина останнього шару значно перевищує товщини інших шарів.

Зокрема, на рис.3.3.-3.5. зображені відповідно напівобмежене

$(I_n^+ = \left\{ z : z \in \bigcup_{i=1}^{n+1} (l_{i-1}, l_i); 0 < l_0 < l_{n+1} < \infty \right\})$ , необмежене  $(I_n^+ = \left\{ z : z \in \bigcup_{i=1}^{n+1} (l_{i-1}, l_i); -\infty = l_0; l_{n+1} = \infty \right\})$

та напівобмежене симетричне середовище  $(I_n^+ = \left\{ z : z \in \bigcup_{i=1}^{n+1} (l_{i-1}, l_i); 0 = l_0 < l_{n+1} = \infty \right\})$ .



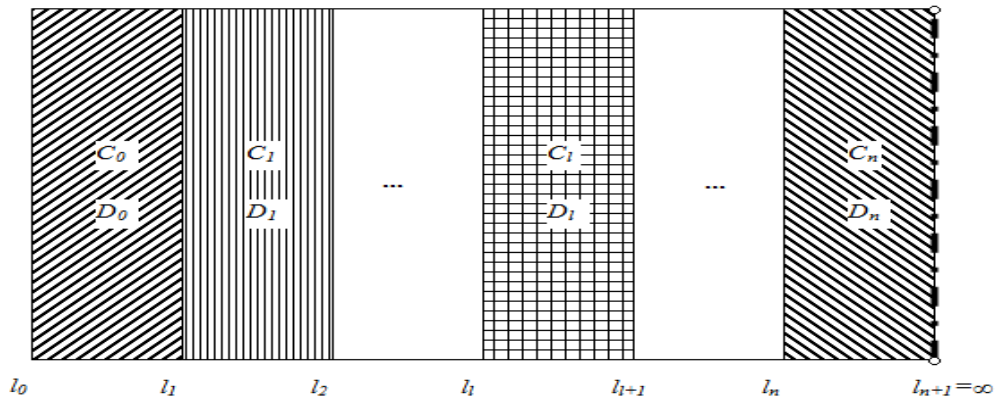


Рис.3.3. Декартове напівобмежене n-складове середовище

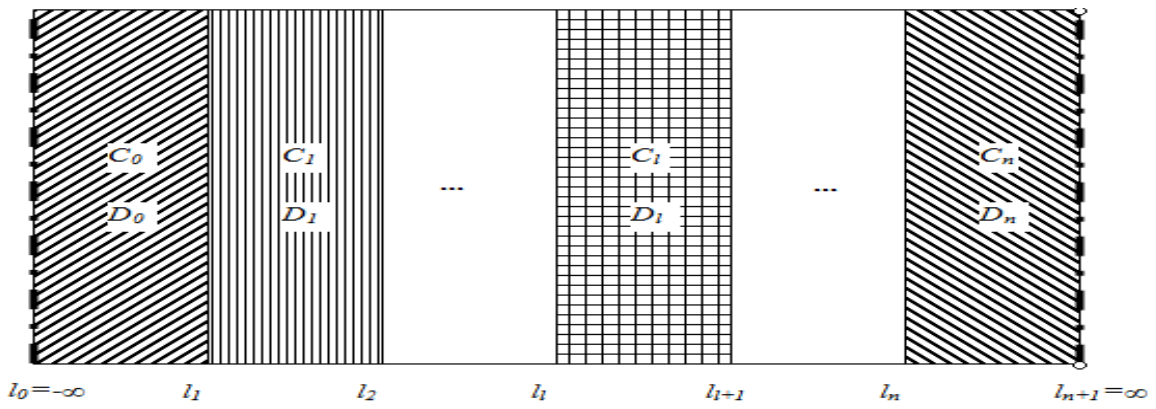


Рис.3.4. Декартове необмежене n-складове середовище

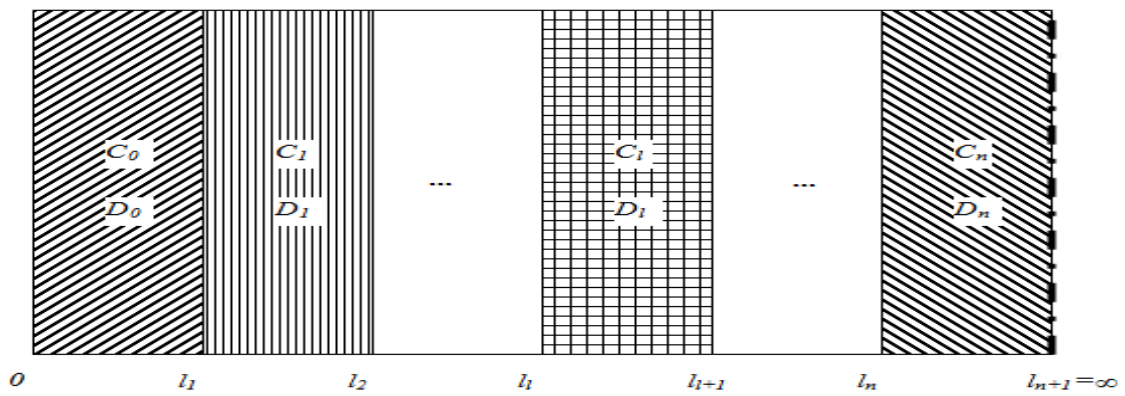


Рис.3.5. Декартове напівобмежене симетричне n-складове середовище

Оскільки технологічне використання нанокompозитів визначає їх різні конструктивні схеми, то ми також будемо розглядати циліндричні наносередовища.

Обмежене суцільне циліндричне середовище

$Z_n^S = \left\{ r : r \in \bigcup_{j=1}^{n+1} (R_{j-1}, R_j); 0 = R_0 < R_{n+1} < \infty \right\}$  складається з  $n$  внутрішностей

циліндричних труб, з радіусами перерізів  $r \in (R_{j-1}, R_j)$ , кожна з яких виготовлена з певного матеріалу, що характеризується коефіцієнтом дифузії  $D_i$  та концентрацією  $C_i$ . Конструктивна схема даного середовища зображена на рис.3.6.

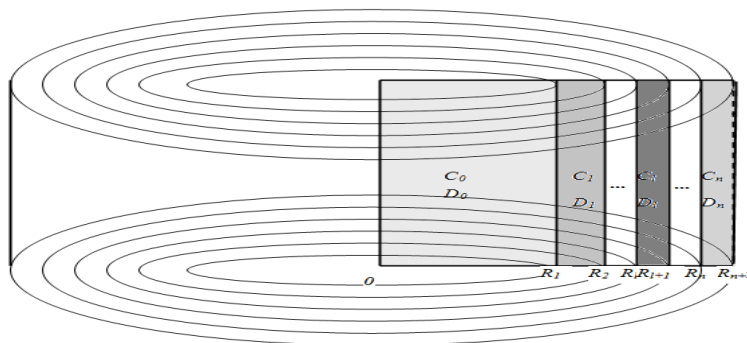


Рис.3.6. Циліндричне обмежене суцільне  $n$ -складове середовище

Аналогічно введемо до розгляду обмежене циліндричне середовище з

порожниною  $Z_n^0 = \left\{ r : r \in \bigcup_{j=1}^{n+1} (R_{j-1}, R_j); 0 = R_0 < R_{n+1} < \infty \right\}$ , конструктивна схема

якого зображена на рис.3.7.

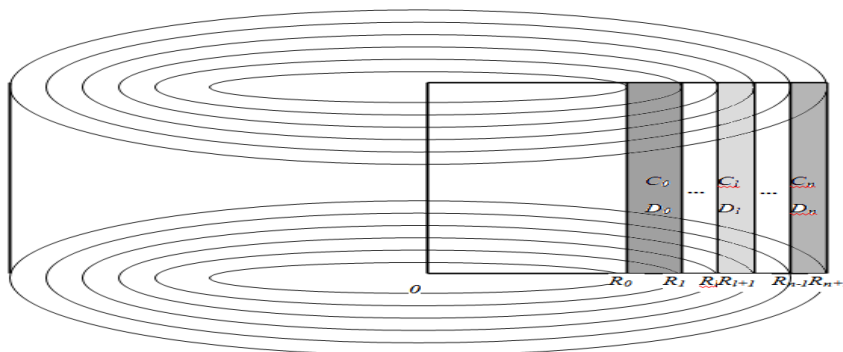


Рис.3.7. Циліндричне обмежене з порожниною  $n$ -складове середовище

При розгляді необмежених циліндричних середовищ будемо мати на увазі, що товщина останньої циліндричної труби значно перевищує товщини інших шарів. Зокрема, конструктивна схема необмеженого суцільного циліндричного середовища  $Z_n^S = \left\{ r : r \in \bigcup_{j=1}^{n+1} (R_{j-1}, R_j); 0 = R_0 < R_{n+1} < \infty \right\}$  зображена на рис.3.8., необмежене циліндричного середовища з порожниною

$Z_n^0 = \left\{ r : r \in \bigcup_{j=1}^{n+1} (R_{j-1}, R_j); 0 = R_0 < R_{n+1} < \infty \right\}$  – на рис. 3.9.

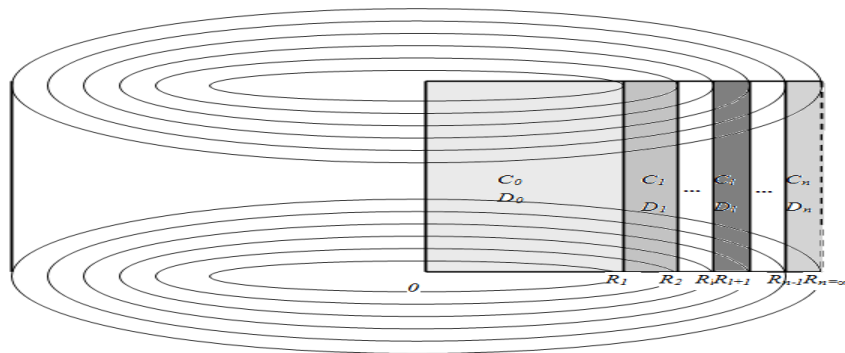


Рис.3.8. Циліндричне необмежене суцільне n-сходове середовище

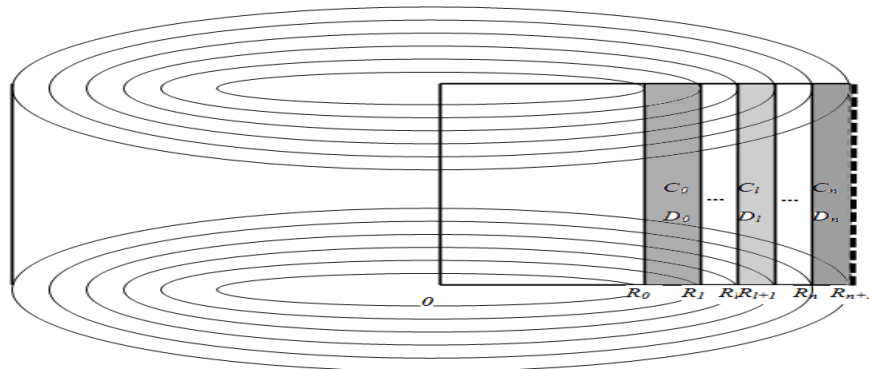


Рис.3.9. Циліндричне необмежене з порожниною n-сходове середовище

Розглянуті конструктивні схеми надалі розглядатимуться як математичні області для визначення моделей переносу досліджуваних структур нанокompозитів.

### 3.2. Двовимірні моделі для прогнозування процесів дифузійного перенесення в обмежених багатоскладових магнітних середовищах з використанням інтегрального перетворення Фур'є

Розглянемо схематизацію перенесення в області  $I_n$  (рис 3.1. та 3.2), що описує багатокомпонентне середовище зі встановленими  $n$  рівномірними шарами. Згідно такої схематизації, для кожного  $j$ -го інтерфейсу  $z=l_j$ ,  $j=\overline{1,n}$  у сформованому мультикомпоненті відбувається взаємодифузія компонент між двома сусідніми шарами середовища. Механізми такого взаємопереносу визначаються наявністю змінних градієнтів та швидкостей зміни концентрацій на інтерфейсних межах між шарами. Моделювати механізми такого додаткового взаємопереносу поряд із основними рівняннями переносу можна шляхом врахування в крайових та інтерфейсних умовах зміни в часі концентрацій та їх градієнтів. Таким чином нам необхідно побудувати обмежений в області  $D_n = \{(t, x, z) : t \geq 0; x(0, R), z \in I_n\}$  розв'язок системи диференціальних рівнянь з частинними похідними 2-го порядку параболічного типу, що описує дифузійний перенос (молекулярний транспорт) в обмеженому  $(n+1)$ -складовому неоднорідному середовищі з нестационарними режимами масообміну на масообмінних поверхнях (лініях)  $z=l_j, j=0, n$

$$\frac{\partial u_m(t, x, z)}{\partial t} = D_R \frac{\partial^2 u_m(t, x, z)}{\partial x^2} + D_m \frac{\partial^2 u_m(t, x, z)}{\partial z^2} + f_m(t, z), z \in (l_{m-1}, l_m), m = \overline{1, n+1} \quad (3.1)$$

за початкових умов

$$u_m(t, x, z)|_{t=0} = g_m(x, z), z \in (l_{m-1}, l_m), m = \overline{1, n+1}, \quad (3.2)$$

крайових умов по змінній  $z$

$$\left[ \nu_{11}^0 \frac{\partial}{\partial z} + \eta_{11}^0 \right] u_1(t, x, z) \Big|_{z=l_0} = g_{l_0}(t, x),$$

$$\left[ \nu_{22}^{n+1} \frac{\partial}{\partial z} + \eta_{22}^{n+1} \right] u_{n+1}(t, x, z) \Big|_{z=l} = g_l(t, x), \quad (3.3)$$

інтерфейсних умов

$$\left\{ \left[ v_{j1}^m \frac{\partial}{\partial z} + \eta_{j1}^m \right] u_{m+1}(t, x, z) - \left[ v_{j2}^m \frac{\partial}{\partial z} + \eta_{j2}^m \right] u_{m+1}(t, x, z) \right\} \Big|_{z=l_m} = 0; \quad j = \overline{1, 2}; \quad m = \overline{1, n} \quad (3.4)$$

та крайових умов по змінній  $x$

$$\begin{aligned} u_m(t, x, z) \Big|_{x=0} &= u_{0_m}(t, z) \\ u_m(t, x, z) \Big|_{x=R} &= u_{R_m}(t, z), \quad x \in (0, R), \quad m = \overline{1, n+1} \end{aligned} \quad (3.5)$$

Тут  $D_R$  – коефіцієнт дифузії по координаті  $x$ ,  $D_m$  – коефіцієнти дифузії по координаті  $z$  для кожного з  $n$  шарів середовища. Умови (3.3)-(3.4) тут подані в загальному вигляді і через вибір необхідних коефіцієнтів  $v_{js}^m$ ,  $\eta_{js}^m$ ,  $j, s = \overline{1, 2}$  уточнюються для кожної конкретної постановки моделі. Також є можливість враховувати і вплив просторово розподілених джерел маси  $f_m(t, z)$ .

До задачі (3.1) - (3.5) застосуємо послідовно інтегральні перетворення:

а) інтегральне перетворення  $\sin$ -Фур'є на сегменті  $(0, R)$  по змінній  $x$ , визначене [74, 115] :

- інтегральним оператором прямої дії

$$F_i [u_m(t, x, z)] = \int_0^h u_m(t, x, z) \sin\left(\frac{i\pi}{R} x\right) dx \equiv u_{mi}(t, z), \quad (3.6)$$

- інтегральним оператором зворотної дії

$$F_i^{-1} [u_{mi}(t, z)] = \frac{2}{R} \sum_{i=1}^{\infty} u_{mi}(t, z) \sin\left(\frac{i\pi}{R} x\right) \equiv u_m(t, x, z); \quad (3.7)$$

- основною тотожністю інтегрального перетворення Фур'є для диференціального оператора Лапласа

$$F_i \left[ \frac{\partial^2 u_m(t, x, z)}{\partial x^2} \right] = - \left( \frac{i\pi}{R} \right)^2 u_{mi}(t, z) + \frac{i\pi}{R} [u_{0_m}(t, z) - (-1)^i u_{R_m}(t, z)]$$

б) по змінній  $z$  скінченне інтегральне перетворення Фур'є для обмеженого неоднорідного  $n+1$  – складового середовища з урахуванням змінних градієнтів в крайових та інтерфейсних умовах має вигляд [74, 98]:

- інтегральний оператор прямої дії

$$F_n [[u_m(t, z)]] = \sum_{m=1}^{n+1} \int_{l_{m-1}}^{l_m} u_m(z) V_m(z, \beta_k) \sigma_m dz \equiv u_k(t), \quad (3.8)$$

- інтегральний оператор зворотної дії

$$F_n^{-1}[u_k(t)] = \sum_{k=1}^{\infty} u_k(t) \frac{V_m(z, \beta_k)}{\|V(z, \beta_k)\|^2} \equiv u_m(t, z). \quad (3.9)$$

- основна тотожність інтегрального перетворення

$$F_n \left[ L_n \left[ \left[ u_m(t, z) \right] \right] \right] = -\beta_k^2 u_k + D_{n+1} \frac{\sigma_{n+1}}{\alpha_{n+1}^{n+1}} V_{n+1}(l, \beta_k) \cdot g_l - D_1 \frac{\sigma_1}{\alpha_1^{n+1}} V_1(l_0, \beta_k) \cdot g_{l_0}, \quad (3.10)$$

де компоненти  $V_j$  спектральної вектор-функції  $V(z, \beta_k)$  визначені таким чином:

$$V_m(z, \beta_k) = \left( \prod_{i=m}^n c_{21,i} q_{i+1,k} \right) \left( \omega_{m-1,2}(\beta_k) \cos q_{mk} z - \omega_{m-1,1}(\beta_k) \sin q_{mk} z \right), m = \overline{1, n};$$

$$V_{n+1}(z, \beta_k) = \omega_{n2}(\beta_k) \cos q_{n+1,k} z - \omega_{n1}(\beta_k) \sin q_{n+1,k} z;$$

$$\omega_{01}(\beta_k) = v_{11}^{01}(b_1 l_0); \quad \omega_{02}(\beta_k) = v_{11}^{02}(b_1 l_0);$$

$$\omega_{mi}(\beta_k) = \omega_{m-1,2}(\beta_k) \psi_{1i}^m(q_m l_m, q_{m+1} l_m) - \omega_{m-1,1}(\beta_k) \psi_{2i}^m(q_m l_m, q_{m+1} l_m);$$

$$\psi_{ji}^m(q_m l_m, q_{m+1} l_m) = v_{11}^{mj}(q_m l_m) v_{22}^{mi}(q_{m+1} l_m) - v_{21}^{mj}(q_m l_m) v_{12}^{mi}(q_{m+1} l_m);$$

$$v_{ij}^{m1}(q_s l_m) \equiv \left( \alpha_{ij}^m \frac{d}{dz} + \beta_{ij}^m \right) \cos q_s z \Big|_{z=l_m} = -\alpha_{ij}^m q_s \sin q_s l_m + \beta_{ij}^m \cos q_s l_m,$$

$$v_{ij}^{m2}(q_s l_m) \equiv \left( \alpha_{ij}^m \frac{d}{dz} + \beta_{ij}^m \right) \sin q_s z \Big|_{z=l_m} = -\alpha_{ij}^m q_s \cos q_s l_m + \beta_{ij}^m \sin q_s l_m; i, j = \overline{1, 2}, s \in \{m, m+1\}$$

$$q_{mk} = \frac{\beta_k}{\sqrt{D_m}}, \quad m = \overline{1, n+1}, \quad c_{im} = \alpha_{2i}^m \beta_{1i}^m - \alpha_{1i}^m \beta_{2i}^m, \quad i, m = 1, 2,$$

$\{\beta_k\}$ ,  $k = \overline{0, \infty}$  - власні числа, що є коренями трансцендентного рівняння:

$$\delta_n(\beta) \equiv \omega_{n2}(\beta) v_{22}^{n+1,1}(q_{n+1} l) - \omega_{n1}(\beta) v_{22}^{n+1,2}(q_{n+1} l) = 0,$$

$$\|V(z, \beta_k)\|^2 = \sum_{m=1}^{n+1} \int_{l_{m-1}}^{l_m} [V_m(z, \beta_k) \sigma_m]^2 dz - \text{квадрат норми,}$$

$$\sigma_m = \frac{1}{D_m} \prod_{i=m}^n \frac{c_{11,i}}{c_{21,i}}, \quad m = \overline{1, n}, \quad \sigma_{n+1} = \frac{1}{D_{n+1}} - \text{компоненти спектральної густини.}$$

В результаті застосування інтегральних операторів (3.6), (3.8) до задачі(3.1)-(3.5) одержимо задачу Коші,

$$\frac{d}{dt} u_{ki}(t) = - \left( D_R \left( \frac{\pi i}{R} \right)^2 + \beta_k^2 \right) u_{ki}(t) + F_{ki}(\tau) \quad (3.11)$$

$$u_{ki}(t)|_{t=0} = g_{ki}$$

розв'язком якої є функція [74, 100]

$$u_{ki}(t) = e^{-\left(D_R\left(\frac{\pi i}{R}\right)^2 + \beta_k^2\right)t} g_{ki} + \int_0^t e^{-\left(D_R\left(\frac{\pi i}{R}\right)^2 + \beta_m^2\right)(t-\tau)} F_{ki}(\tau) d\tau, \quad (3.12)$$

$$\text{де } F_{ki}(t) = g_{ki} + \Phi_{1_{ki}}(t) + \Phi_{2_{ki}}(t) + f_{ki}(t),$$

$$\Phi_{1_{ki}}(t) = \frac{\pi i}{R} \left[ u_{0_k}(t) - (-1)u_{R_k}(t) \right],$$

$$\Phi_{2_{ki}}(t) = D_{n+1} \frac{\sigma_{n+1}}{\alpha_{22}^{n+1}} V_{n+1}(l, \beta_k) g_{l_i}(t) - D_1 \frac{\sigma_1}{\alpha_{11}^1} V_1(l_0, \beta_k) g_{l_{0i}}(t),$$

$$g_{ki} = \sum_{m=1}^{n+1} g_{m_{ki}}, \quad f_{ki}(t) = \sum_{m=1}^{n+1} f_{m_{ki}}(t), \quad f_{ki}(t) = \sum_{m=1}^{n+1} f_{m_{ki}}(t), \quad g_{ki} = \sum_{m=1}^{n+1} g_{m_{ki}}(z).$$

Повертаючись до оригіналів, з послідовним застосуванням інтегральних операторів зворотної дії, визначеними формулами (3.7), (3.9), отримаємо розв'язок задачі (3.1) [74, 98]

$$\begin{aligned} u_m(t, x, z) = & \int_0^t \int_0^R \left[ W_{l_0, m}(t-\tau; x, \zeta; z, l_0) g_{l_0}(\tau, \zeta) + W_{l_m}(t-\tau; x; \zeta; z, l) g_l(\tau, \zeta) \right] d\zeta d\tau + \\ & + \int_0^t \sum_{m_1=1}^{n+1} \int_{l_{m_1-1}}^{l_{m_1}} \left[ W_{0, m_1}(t-\tau; x, 0; z, \xi) u_{0, m_1}(\tau, \xi) + W_{R, m_1}(t-\tau; x; R, z, \xi) u_{R, m_1}(\tau, \xi) \right] d\xi d\tau + \\ & \int_0^R \sum_{m_1=0}^{n+1} \int_{l_{m_1-1}}^{l_{m_1}} H_{m, m_1}(t; x, \zeta; z, \xi) g_{m_1}(\zeta, \xi) \sigma_{m_1} d\xi d\zeta + \\ & + \int_0^t \int_0^R \sum_{m_1=0}^{n+1} \int_{l_{m_1-1}}^{l_{m_1}} H_{m, m_1}(t-\tau; x, \zeta; z, \xi) f_{m_1}(\tau, \zeta, \xi) \sigma_{m_1} d\xi d\zeta d\tau, \quad m = \overline{1, n+1} \end{aligned} \quad (3.13)$$

У цій формулі визначені функції впливу, які описуються наступними виразами:

- функції впливу крайових умов по просторовій змінній  $z$

$$W_{l_0, m}(t; x, \zeta; z, l_0) = -D_1 \frac{\sigma_1}{\alpha_{11}^1} \frac{2}{R} \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} e^{-\left(D_R \left(\frac{i\pi}{R}\right)^2 + \beta_m^2\right)t} \cdot \frac{V_1(l_0, \beta_k) \cdot V_m(z, \beta_k)}{\|V(z, \beta_k)\|^2} \sin\left(\frac{i\pi}{R} x\right), \quad (3.14)$$

$$W_{l_m}(t; x, \zeta; z, l) = D_{n+1} \frac{\sigma_{n+1}}{\alpha_{22}^1} \frac{2}{R} \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} e^{-\left(D_R \left(\frac{i\pi}{R}\right)^2 + \beta_m^2\right)t} \cdot \frac{V_{n+1}(l, \beta_k) \cdot V_m(z, \beta_k)}{\|V(z, \beta_k)\|^2} \sin\left(\frac{i\pi}{R} x\right), \quad (3.15)$$

- функції впливу крайових умов по просторовій змінній  $x$

$$W_{0, m_1}(t; x, 0; z, \xi) = \frac{2}{R} \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{i\pi}{R} e^{-\left(D_R \left(\frac{i\pi}{R}\right)^2 + \beta_k^2\right)t} \frac{V_1(\xi, \beta_k) \cdot V_m(z, \beta_k)}{\|V(z, \beta_k)\|^2} \sin\left(\frac{i\pi}{R} x\right), \quad (3.16)$$

$$W_{R, m_1}(t; x, R; z, \xi) = \frac{2}{R} \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{i\pi}{R} (-1)^{i+1} e^{-\left(D_R \left(\frac{i\pi}{R}\right)^2 + \beta_k^2\right)t} \frac{V_{m_1}(\xi, \beta_k) \cdot V_m(z, \beta_k)}{\|V(z, \beta_k)\|^2} \sin\left(\frac{i\pi}{R} x\right),$$

- функція впливу початкових умов та неоднорідностей системи

$$H_{\eta, m_1}(t, x, \zeta; z, \xi) = \frac{2}{R} \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{m_1=1}^{\infty} e^{-\left(D_R \left(\frac{i\pi}{R}\right)^2 + \beta_k^2\right)t} \frac{V_m(z, \beta_k) V_{m_1}(\xi, \beta_m)}{\|V(z, \beta_m)\|^2} \sin\left(\frac{\pi i}{R} \zeta\right) \sin\left(\frac{\pi i}{R} x\right). \quad (3.17)$$

$$m, m_1 = \overline{1, n+1}$$

### 3.3. Застосування інтегрального перетворення Фур'є функцій, заданих в напівобмежених просторах, для моделювання процесів дифузійного перенесення в багат шарових магнітних наноплівках

Проаналізуємо конструктивну схему (рис.3.3), що розглядається як математична область для визначення моделей багатокомпонентного середовища зі встановленими  $n$  рівномірними шарами та  $n+1$ -им шаром, товщина якого набагато перевищує попередні. Згідно такої схематизації, для кожного  $j$ -го інтерфейсу  $z = l_j$ ,  $j = \overline{1, n}$  у сформованому мультикомполіті відбувається взаємодифузія компонент між двома сусідніми шарами середовища. В результаті математична модель для такої системи переносу описана у вигляді наступної змішаної крайової задачі: побудувати обмежений в області  $D_n^+ = \{(t, z) : t \in (0, \infty) \cup I_n^+\}$  розв'язок системи диференціальних рівнянь переносу параболічного типу для напівобмеженого  $n$ -складового неоднорід-



ного середовища при нестационарності масообміну на межах масообміну  $z = l_j, j = 0, n$ .

$$\frac{\partial u_k(t, x, z)}{\partial t} = D_h \frac{\partial^2 u_k(t, x, z)}{\partial x^2} + D_k \frac{\partial^2 u_k(t, x, z)}{\partial z^2} + f_k(t, z), z \in (l_{k-1}, l_k), k = \overline{1, n+1} \quad (3.18)$$

за початкових умов

$$u_k(t, x, z)|_{t=0} = g_k(x, z), z \in (l_{k-1}, l_k), l_{n+1} = \infty, k = \overline{1, n+1}, \quad (3.19)$$

крайових умов по змінній  $z$

$$\left[ v_{11}^0 \frac{\partial}{\partial z} + \eta_{11}^0 \right] u_1(t, x, z) \Big|_{z=l_0} = u_{l_0}(t, x), \quad (3.20)$$

$$\frac{\partial u_{n+1}(t, x, z)}{\partial z} \Big|_{z=\infty} = 0$$

інтерфейсних умов по змінній  $z$

$$\left\{ \left[ v_{j1}^k \frac{\partial}{\partial z} + \eta_{j1}^k \right] u_{k+1}(t, x, z) - \left[ v_{j2}^k \frac{\partial}{\partial z} + \eta_{j2}^k \right] u_{k+1}(t, x, z) \right\} \Big|_{z=l_k} = 0; \quad j = \overline{1, 2}; \quad k = \overline{1, n} \quad (3.21)$$

крайових умов по змінній  $x$

$$\frac{\partial u_k(t, x, z)}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0, \quad (3.22)$$

$$u_k(t, x, z) \Big|_{x=h} = u_{h_k}(t, z), x \in (0, h), k = \overline{1, n+1}$$

До описаної задачі застосуємо послідовно інтегральні перетворення:

а) інтегральне перетворення cos-Фур'є на сегменті  $(0, h)$  по змінній  $x$ , визначене [74, 97]:

- інтегральним оператором прямої дії

$$F_i [u_k(t, x, z)] = \int_0^h u_k(t, x, z) \cos\left(\frac{i\pi}{h} x\right) dx \equiv u_{ki}(t, z), \quad (3.23)$$

- інтегральним оператором зворотної дії

$$F_i^{-1} [u_{ki}(t, z)] = \frac{1}{h} \sum_{i=0}^{\infty} \varepsilon_i u_{ki}(t, z) \cos\left(\frac{i\pi}{h} x\right) \equiv u_k(t, x, z); \quad \varepsilon_i = \begin{cases} 1, & i=0 \\ 2, & i=1, 2, \dots \end{cases}, \quad (3.24)$$

- основною тотожністю інтегрального перетворення Фур'є для диференціального оператора Лапласа

$$F_i \left[ \frac{\partial^2 u_k(t, x, z)}{\partial x^2} \right] = - \left( \frac{i\pi}{h} \right)^2 u_{ki}(t, z) + \frac{i\pi}{h} (-1)^{i+1} u_{h_k}(t, z);$$

б) по змінній  $z$  інтегральне перетворення Фур'є для  $n$ -складового напівобмеженого середовища має вигляд [74, 97]:

- інтегральний оператор прямої дії

$$F_{+,n} \left[ [u_k(t, z)] \right] = \int_{l_0}^{\infty} u(z) V(z, \beta) \sigma(z) dz = \sum_{k=1}^{n+1} \int_{l_{k-1}}^{l_k} u_k(z) V_k(z, \beta) \sigma_k dz \equiv \tilde{u}(t), \quad (3.25)$$

- інтегральний оператор зворотної дії

$$F_{+,n}^{-1} [\tilde{u}(t)] = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \tilde{u}(t) V(z, \beta) \Omega_n(\beta) dt \equiv u(t, z), \quad (3.26)$$

компонентами якого є  $F_{+,n}^{-1} [\dots] = \begin{bmatrix} \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \dots V_1(z, \beta) \Omega_n(\beta) d\beta \\ \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \dots V_2(z, \beta) \Omega_n(\beta) d\beta \\ \dots \\ \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \dots V_{n+1}(z, \beta) \Omega_n(\beta) d\beta \end{bmatrix},$

- основна тотожність інтегрального перетворення

$$F_{+,n} \left[ L_n \left[ [u_k(t, z)] \right] \right] = -\beta^2 \tilde{u}(t) - \frac{D_1}{\alpha_{11}^0} \sigma_1 V_1(l_0, \beta) g_{l_0}.$$

Тут компоненти  $V_j(z, \beta)$  спектральної вектор-функції  $V(z, \beta)$  визначені таким чином [74, 77, 97]

$$V_k(z, \beta) = \left( \prod_{i=k}^n c_{21, i} q_{i+1} \right) \left( \omega_{m-1,2}(\beta) \cos q_k z - \omega_{k-1,1}(\beta) \sin q_k z \right), m = \overline{1, n};$$

$$V_{n+1}(z, \beta) = \omega_{n2}(\beta) \cos q_{n+1} z - \omega_{n1}(\beta) \sin q_{n+1} z;$$

$$\omega_{01}(\beta) = v_{11}^{01}(q_1 l_0); \quad \omega_{02}(\beta) = v_{11}^{02}(q_1 l_0);$$

$$\omega_{ki}(\beta) = \omega_{k-1,2}(\beta) \psi_{1i}^k(q_k l_k, q_{k+1} l_k) - \omega_{k-1,1}(\beta) \psi_{2i}^k(q_k l_k, q_{k+1} l_k);$$

$$\psi_{ji}^k(q_k l_k, q_{k+1} l_k) = v_{11}^{kj}(q_k l_k) v_{22}^{ki}(q_{k+1} l_k) - v_{21}^{kj}(q_k l_k) v_{12}^{ki}(q_{k+1} l_k);$$

$$v_{ij}^{k1}(q_s l_k) \equiv \left( \alpha_{ij}^k \frac{d}{dz} + \beta_{ij}^k \right) \cos q_s z \Big|_{z=l_k} = -\alpha_{ij}^k q_s \sin q_s l_k + \beta_{ij}^k \cos q_s l_k,$$

$$v_{ij}^{k2}(q_s l_k) \equiv \left( \alpha_{ij}^k \frac{d}{dz} + \beta_{ij}^k \right) \sin q_s z \Big|_{z=l_k} = -\alpha_{ij}^k q_s \cos q_s l_k + \beta_{ij}^k \sin q_s l_k; i, j = \overline{1, 2}, s \in \{k, k+1\},$$

$$q_k = \frac{\beta}{\sqrt{D_k}}, k = \overline{1, n+1}, c_{im} = \alpha_{2i}^m \beta_{1i}^m - \alpha_{1i}^m \beta_{2i}^m, i, m = 1, 2.$$

Спектральна густина [74, 77]

$$\Omega_n(\beta) = \frac{\sqrt{D_{n+1}}}{\omega_{n,1}(\beta)^2 + \omega_{n,2}(\beta)^2} \quad (3.27)$$

Компоненти вагової функції визначаються формулами [77, 97]

$$\sigma_k = \frac{1}{D_k} \prod_{i=k}^n \frac{c_{1i}}{c_{2i}}, k = \overline{1, n-1}; \sigma_n = \frac{1}{D_n} \frac{c_{1,n}}{c_{2,n}}; \sigma_{n+1} = \frac{1}{D_{n+1}}.$$

Застосувавши до задачі (3.18-3.22) інтегральні оператори (3.23), (3.25), одержуємо задачу Коші

$$\frac{d}{dt} \tilde{u}_i(t, \beta) + \left( D_R \left( \frac{\pi i}{R} \right)^2 + \beta^2 \right) \tilde{u}_i(t) = \tilde{F}_i(t), \quad (3.28)$$

$$\tilde{u}_i(t) \Big|_{t=0} = \tilde{g}_i$$

розв'язком якої є функція [74, 5]

$$\tilde{u}_i(t, \beta) = e^{-\left( D_R \left( \frac{\pi i}{R} \right)^2 + \beta^2 \right) t} \tilde{g}_i + \int_0^t e^{-\left( D_R \left( \frac{\pi i}{R} \right)^2 + \beta^2 \right) (t-\tau)} \tilde{F}_i(\tau) d\tau, \quad (3.29)$$

$$\text{де } \tilde{F}_i(t) = \tilde{g}_i + \tilde{\Phi}_i(t) + \tilde{f}_i(t),$$

$$\tilde{g}_i = \sum_{k=1}^{n+1} \int_{l_{k-1}}^{l_k} g_{k_i}(z) V_k(z, \beta) \sigma_k dz,$$

$$\tilde{\Phi}_i(t) = -D_1 \frac{\sigma_1}{\alpha_{11}} V_1(l_0, \beta) u_{l_{0i}}(t).$$

Повертаючись до оригіналів, з послідовним застосуванням інтегральних операторів зворотної дії, визначеними формулами (3.24), (3.26), отримаємо наступний розв'язок задачі (3.18)-(3.22) [74, 5].

$$\begin{aligned}
u_k(t, x, z) = & \int_0^t \int_0^h W_{l_0, k}(t - \tau; x, \zeta; z, l_0) u_{l_0}(\tau, \zeta) d\zeta d\tau + \\
& + \int_0^t \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_{l_{m_1-1}}^{l_{k_1}} W_{h_k, k_1}(t - \tau; x; h, z, \xi) u_{h_{k_1}}(\tau, \xi) \sigma_{k_1} d\xi d\tau + \\
& + \int_0^h \sum_{k_1=0}^{n+1} \int_{l_{k_1-1}}^{l_{k_1}} H_{h_k, k_1}(t; x, \zeta; z, \xi) g_{k_1}(\zeta, \xi) \sigma_{k_1} d\xi d\zeta + \\
& + \int_0^t \int_0^h \sum_{k_1=0}^{n+1} \int_{l_{k_1-1}}^{l_{k_1}} H_{h_k, k_1}(t - \tau; x, \zeta; z, \xi) f_{k_1}(\tau, \zeta, \xi) \sigma_{k_1} d\xi d\zeta d\tau, \quad k = \overline{1, n+1}
\end{aligned} \tag{3.30}$$

У цій формулі визначені функції впливу, що описуються наступними виразами:

- функції впливу, породжені крайовою умовою в точці  $z = l_0$

$$W_{l_0, k}(t; x, \zeta; z, l_0) = -D_1 \frac{\sigma_1}{\alpha_{11}^1} \frac{2}{\pi h} \sum_{i=0}^{\infty} \int_0^{\infty} \varepsilon_i e^{-\left(D_R \left(\frac{i\pi}{R}\right)^2 + \beta^2\right)t} V_1(l_0, \beta) V_k(z, \beta) \Omega_n(\beta) \cos\left(\frac{i\pi}{h} x\right) d\beta, \tag{3.31}$$

- функції впливу крайових умов по координаті  $x$

$$W_{h_k, k_1}(t; x, h; z, \xi) = \frac{2}{\pi} \sum_{i=0}^{\infty} \int_0^{\infty} \varepsilon_i \frac{i\pi}{h^2} (-1)^{i+1} e^{-\left(D_h \left(\frac{i\pi}{R}\right)^2 + \beta^2\right)t} V_{k_1}(\xi, \beta) V_k(z, \beta) \Omega_n(\beta) \cos\left(\frac{i\pi}{h} x\right) d\beta, \tag{3.32}$$

- функція впливу початкових умов та неоднорідностей системи

$$H_{h_k, k_1}(t, x, \zeta; z, \xi) = \frac{2}{\pi h} \sum_{i=0}^{\infty} \int_0^{\infty} \varepsilon_i e^{-\left(D_R \left(\frac{i\pi}{R}\right)^2 + \beta^2\right)t} V_k(z, \beta) V_{k_1}(\xi, \beta) \cos\left(\frac{\pi i}{h} \zeta\right) \cos\left(\frac{\pi i}{h} x\right) d\beta \tag{3.33}$$

$k, k_1 = \overline{1, n+1}$

### 3.4. Двовимірні моделі процесів дифузійного перенесення в багат шарових магнітних середовищах циліндричної конструкції з використанням інтегральних перетворення типу Фур'є-Бесселя

Дифузійні процеси переносу в багат шарових циліндричних середовищах напівобмеженої та обмеженої конструкції зумовлені різними фізико-хімічних характеристиками в окремих шарах, агрегатованими по радіальній чи осьовій координаті.

#### 3.4.1. Модель дифузійного перенесення в напівобмежених багат шарових (по радіальній координаті $r$ ) середовищ

Двовимірна математична модель процесів дифузійного перенесення в напівобмежених багат шарових (по радіальній координаті  $r$ ) циліндричних магнітних середовищах (рис. 3.8), полягає в побудові обмеженого в області

$$D_n^+ = \left\{ (t, r, x) : t > 0, r \in \bigcup_{m=1}^{n+1} (R_{m-1}, R_m); R_0 = 0; R_{n+1} = \infty, x \in (0, h) \right\}:$$

$$\frac{\partial u_m(t, r, x)}{\partial t} = D_{R_m} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) u_m(t, r, x) + D_h \frac{\partial^2 u_m}{\partial x^2}, \quad (3.34)$$

за початкових умов

$$u_m(t, r, x) \Big|_{t=0} = q_m, r \in (R_{m-1}, R_m); m = \overline{1, n+1}, R_0 = 0, \quad (3.35)$$

крайових умов

$$\frac{\partial}{\partial r} u_1(t, r, x) \Big|_{r=0} = 0, \quad \frac{\partial u_{n+1}(t, r, x)}{\partial r} \Big|_{r=\infty} = 0, \quad (3.36)$$

інтерфейсних умов (спряження) по змінній  $r$

$$\left\{ \left[ \alpha_{j1}^m \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{j1}^m \right] u_{m+1}(t, r, x) - \left[ \alpha_{j2}^m \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{j2}^m \right] u_{m+1}(t, r, x) \right\} \Big|_{r=R_m} = 0; j = \overline{1, 2}; m = \overline{1, n} \quad (3.37)$$

крайових умов по змінній  $x$ :  $\frac{\partial u_m}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0, u_m \Big|_{x=h} = u_{h_m}$  (3.38)

До описаної задачі застосуємо послідовно інтегральні перетворення:

а) інтегральне перетворення  $\cos$ -Фур'є на сегменті  $(0, h)$  по змінній  $x$ , визначене формулами (3.23)-(3.24) [74, 97];

б) по змінній  $r$  інтегральне перетворення Фур'є-Бесселя для  $n$ -складового напівобмеженого середовища має вигляд [74, 104]:

- інтегральний оператор прямої дії

$$B_{n+} [q(r)] = \int_0^{\infty} q(r) V_0(r, \lambda) \sigma(r) dr \equiv \tilde{q}(\lambda), \quad (3.39)$$

компоненти якого мають вигляд

$$B_{n+} [\dots] = \left[ \int_0^{R_1} \dots V_{0_1}(r, \lambda) \sigma_1 r dr \int_{R_1}^{R_2} \dots V_{0_2}(r, \lambda) \sigma_2 r dr \dots \right. \\ \left. \dots \int_{R_{n-1}}^{R_n} \dots V_{0_n}(r, \lambda) \sigma_n r dr \int_{R_n}^{\infty} \dots V_{0_{n+1}}(r, \lambda) \sigma_{n+1} r dr \right], \quad (3.40)$$

- інтегральний оператор зворотної дії

$$B_{n+}^{-1} [\tilde{q}(\lambda)] = \int_0^{\infty} \tilde{q}(\lambda) V_0(r, \lambda) \Omega(v, \alpha)(\lambda) d\beta \equiv q(r), \quad (3.41)$$

компоненти якого мають вигляд

$$B_{n+}^{-1} [\dots] = \left[ \begin{array}{c} \int_0^{\infty} \dots V_{0_1}(r, \lambda) \Omega_0(\lambda) d\beta \\ \int_0^{\infty} \dots V_{0_2}(r, \lambda) \Omega_0(\lambda) d\beta \\ \dots \\ \int_0^{\infty} \dots V_{0_{n+1}}(r, \lambda) \Omega_0(\lambda) d\beta \end{array} \right]. \quad (3.42)$$

Основна тотожність інтегрального перетворення гібридного диференціального оператора  $B_{n+}$  [75]:

$$B_n [B_0 [q(r)]] = -\lambda^2 \tilde{q}(\lambda), \quad R_0 = 0, \quad R_{n+1} = \infty. \quad (3.43)$$

Тут компоненти  $V_0(r, \lambda)$  спектральної вектор-функції  $V_0(r, \lambda)$  визначені таким чином [75, 100]

$$V_m(z, \lambda) = \left( \prod_{i=m}^n c_{21, i} q_{i+1} \right) \left( \omega_{m-1,2}(\lambda) \cos q_m z - \omega_{m-1,1}(\lambda) \sin q_m z \right), m = \overline{1, n};$$

$$V_{n+1}(z, \lambda) = \omega_{n2}(\lambda) \cos q_{n+1} z - \omega_{n1}(\lambda) \sin q_{n+1} z;$$

$$V_{0_1}(r, \lambda) = \delta_{0,n}(\lambda) J_0(b_1 r); b_j(\lambda) = \frac{\lambda}{D_{R_j}};$$

$$V_{0_j}(r, \lambda) = \left[ \prod_{i=j+1}^n \delta_{0_{i+1}}(\lambda) \right] \left[ \omega_{02}^j(\lambda) J_{0_{j1}}(b_j r) - \omega_{01}^j(\lambda) N_{0_{j1}}(b_j r) \right], k = \overline{2, n};$$

$$V_{0_{n+1}}(r, \lambda) = \omega_{02}^n(\lambda) J_{0_{n+1}}(b_{n+1} r) - \omega_{01}^n(\lambda) N_{0_{n+1}}(b_{n+1} r);$$

$$\delta_{0_n}(\lambda) = \prod_{i=1}^n \delta_{0_{i+1}}(\lambda) = \prod_{i=1}^n \frac{2}{\pi} \frac{c_{2i}}{R_i b_{i+1}};$$

$$\omega_{mi}(\beta) = \omega_{m-1,2}(\lambda) \psi_{1i}^m(b_m R_m, b_{m+1} R_m) - \omega_{m-1,1}(\lambda) \psi_{2i}^m(b_m R_m, b_{m+1} R_m);$$

$$\omega_{1i}(\lambda) = \psi_{1i}^1(b_1 R_1, b_2 R_2), i = \overline{1, 2}$$

$$\psi_{ji}^m(b_m R_m, b_{m+1} R_m) = v_{11}^{mj}(b_m R_m) v_{22}^{mi}(b_{m+1} R_m) - v_{21}^{mj}(b_m R_m) v_{12}^{mi}(b_{m+1} R_m);$$

$$v_{ij}^{m1}(b_s R_m) \equiv \left( \alpha_{ij}^m \frac{d}{dr} + \beta_{ij}^m \right) J_0(b_s r) \Big|_{r=R_m},$$

$$v_{ij}^{m2}(b_s R_m) \equiv \left( \alpha_{ij}^m \frac{d}{dr} + \beta_{ij}^m \right) J_0(b_s r) \Big|_{r=R_m}, i, j = \overline{1, 2}, s \in \{m, m+1\}$$

$$m = \overline{1, n+1}, c_{ij} = \alpha_{2i}^j \beta_{1i}^j - \alpha_{1i}^j \beta_{2i}^j, i, j = \overline{1, 2}.$$

Спектральна густина описується рівністю [74, 96]

$$\Omega_0(\lambda) = \frac{\lambda b_{n+1}}{\left[ \omega_{0_1}^0(\lambda) \right]^2 + \left[ \omega_{0_2}^n(\lambda) \right]^2}.$$

Вагова функція має вигляд

$$\sigma(r) = \sum_{k=1}^n \sigma_k r \Theta(r - R_{k-1}) \Theta(R_k - r) + \sigma_{n+1} r^1 \Theta(r - R_n),$$

компоненти її описуються відповідними формулами:

$$\sigma_m = \frac{1}{D_{R_m}} \prod_{j=m}^n \frac{c_{1j}}{c_{2j}} \frac{R_{j+1}}{R_j}, k = \overline{1, n-1}; \sigma_n = \frac{1}{D_{R_n}} \frac{c_{1n}}{c_{2n}}; \sigma_{n+1} = \frac{1}{D_{R_{n+1}}}. \quad (3.44)$$

В результаті застосування (3.23) – (3.39) до задачі (3.34) – (3.38) одержуємо задачу Коші:

$$\frac{d}{dt} \tilde{u}_i(t, \lambda) = - \left( D_h \left( \frac{\pi i}{R} \right)^2 + \lambda^2 \right) \tilde{u}_i(t) = \tilde{F}_i(t), \quad (3.45)$$

$$\tilde{u}_i(t)|_{t=0} = \tilde{g}_i.$$

Розв'язком задачі Коші (3.45) є функція [74]

$$\tilde{u}_i(t, \lambda) = e^{-\left( D_h \left( \frac{\pi i}{h} \right)^2 + \lambda^2 \right) t} \tilde{g}_i + \int_0^t e^{-\left( D_h \left( \frac{\pi i}{h} \right)^2 + \lambda^2 \right) (t-\tau)} \tilde{F}_i(\tau) d\tau, \quad (3.46)$$

$$\text{де } \tilde{F}_i(t) = \tilde{g}_i + \tilde{f}_i(t), \quad \tilde{g}_i = \sum_{m=1}^{n+1} \int_{R_{m-1}}^{R_m} g_{m_i}(r) V_{0_m}(r, \lambda) \sigma_m dr.$$

Повертаючись до оригіналів, з послідовним застосуванням інтегральних операторів зворотної дії, визначеними формулами (3.25), (3.40), отримаємо наступний розв'язок задачі (3.23)-(3.39) [74, 5].

$$\begin{aligned} u_m(t, r, x) = & \int_0^t \sum_{m_1=1}^{n+1} \int_{R_{m_1-1}}^{R_{m_1}} W_{h_{m,m_1}}(t-\tau; r, \rho; x, h) u_{h_{m_1}}(\tau, \rho) \sigma_{m_1} \rho d\rho d\tau + \\ & + \int_0^h \sum_{m_1=0}^{n+1} \int_{R_{m_1-1}}^{R_{m_1}} H_{h_{m,m_1}}(t; r, \rho; x, \zeta) g_{m_1}(\rho, \zeta) \sigma_{m_1} \rho d\rho d\zeta + \\ & + \int_0^t \int_0^h \sum_{m_1=0}^{n+1} \int_{R_{m_1-1}}^{R_{m_1}} H_{h_{m,m_1}}(t-\tau; r, \rho; x, \zeta) f_{m_1}(\tau, \rho, \zeta) \sigma_{m_1} \rho d\rho d\zeta d\tau, \quad m = \overline{1, n+1} \end{aligned} \quad (3.47)$$

У цій формулі визначені функції впливу, що описуються наступними виразами:

- функції впливу крайової умови по координаті x (при x=h)

$$W_{h_{m,m_1}}(t; r, \rho; x, h) = \frac{2}{\pi} \sum_{i=0}^{\infty} \int_0^{\infty} \varepsilon_i \frac{i\pi}{h^2} (-1)^{i+1} e^{-\left( D_h \left( \frac{i\pi}{R} \right)^2 + \lambda^2 \right) t} V_{0_{m_1}}(\rho, \lambda) V_{0_m}(r, \lambda) \Omega_n(\beta) \cos\left( \frac{i\pi}{h} x \right) d\lambda \quad (3.48)$$

- функція впливу початкових умов та неоднорідностей системи:



$$H_{m,m_1}^h(t; r, \rho; x, \zeta) = \frac{2}{\pi h} \sum_{i=0}^{\infty} \int_0^{\infty} \varepsilon_i e^{-\left(D_R \left(\frac{i\pi}{R}\right)^2 + \lambda^2\right)t} V_{0_{m_1}}(\rho, \lambda) V_{0_m}(r, \lambda) \cos\left(\frac{\pi i}{R} \zeta\right) \cos\left(\frac{\pi i}{R} x\right) d\lambda \quad (3.49)$$

$$m, m_1 = \overline{1, n+1}$$

### 3.4.2. Модель дифузійного перенесення в напівобмежених багат шарових (по радіальній координаті $r$ ) середовищах з порожниною

Розглянемо схематизацію масоперенесення в області  $Z_n^0$  (рис. 3.9), що описує багат шарове циліндричне необмежене  $n$ -складове неоднорідне середовище з симетричною порожниною зі встановленими  $n$  рівномірними шарами та  $n+1$ -им шаром, товщина якого набагато перевищує попередні. Математична модель для такої системи переносу буде описана у вигляді наступної крайової задачі: побудувати обмежений в області

$$D_n^+ = \left\{ (t, r, x) : t > 0, r \in \bigcup_{m=1}^{n+1} (R_{m-1}, R_m); R_0 = 0; R_{n+1} = \infty, x \in (0, h) \right\} :$$

$$\frac{\partial u_m(t, r, x)}{\partial t} = D_{R_m} B_0[u_m] + D_h \frac{\partial^2 u_m}{\partial x^2}, \quad (B_0 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}) \quad (3.50)$$

за початкових умов

$$u_m(t, r, x)|_{t=0} = q_m, r \in (R_{m-1}, R_m); m = \overline{1, n+1}, R_0 = 0,$$

крайових умов

$$u_1(t, r, x)|_{r=R_0} = u_{R_0}, \quad \frac{\partial u_{n+1}(t, r, x)}{\partial r}|_{r=\infty} = 0, \quad (3.51)$$

інтерфейсних умов (спряження) по змінній  $r$

$$\left\{ \left[ \alpha_{j1}^m \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{j1}^m \right] u_{m+1}(t, r, x) - \left[ \alpha_{j2}^m \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{j2}^m \right] u_{m+1}(t, r, x) \right\} \Big|_{r=R_m} = 0; j = \overline{1, 2}; m = \overline{1, n} \quad (3.52)$$

$$\text{крайових умов по змінній } x: \frac{\partial u_m}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0, u_m \Big|_{x=h} = u_{h_m} \quad (3.53)$$

Методика побудови гібридного інтегрального перетворення типу Вебера для необмежених неоднорідних циліндричних середовищ із симетричною порожниною з урахуванням градієнтів і швидкостей зміни параметрів переносу

розглянуто в праці [76]. За алгоритмічною схемою, поданою в п.3.4.1, отримаємо наступний розв'язок задачі (3.50) – (3.53) [74, 5].

$$\begin{aligned}
 u_m(t, r, x) = & \int_0^t \int_0^h \sum_{m_1=1}^{n+1} W_{R_0, m_1}(t-\tau; r, R_0; x, \zeta) u_{R_0}(\tau, \zeta) d\zeta d\tau + \\
 & + \int_0^t \sum_{m_1=1}^{n+1} \int_{R_{m_1-1}}^{R_{m_1}} W_{h, m_1}(t-\tau; r, \rho; x, h) u_{h, m_1}(\tau, \rho) \sigma_{m_1} \rho d\rho d\tau + \\
 & + \int_0^h \sum_{m_1=0}^{n+1} \int_{R_{m_1-1}}^{R_{m_1}} H_{h, m_1}(t; r, \rho; x, \zeta) g_{m_1}(\rho, \zeta) \sigma_{m_1} \rho d\rho d\zeta + \\
 & + \int_0^t \int_0^h \sum_{m_1=0}^{n+1} \int_{R_{m_1-1}}^{R_{m_1}} H_{h, m_1}(t-\tau; r, \rho; x, \zeta) f_{m_1}(\tau, \rho, \zeta) \sigma_{m_1} \rho d\rho d\zeta d\tau, \quad m = \overline{1, n+1}
 \end{aligned} \tag{3.54}$$

У цій формулі визначені функції впливу, що описуються наступними виразами:

- функції впливу крайової умови по координаті  $r$  (при  $r=R_0$ )

$$W_{R_0, m_1}(t, r, R_0, x, \xi) = \frac{2}{\pi} \sum_{i=0}^{\infty} \int_0^{\infty} \varepsilon_i e^{-\left(D_h \left(\frac{i\pi}{R}\right)^2 + \beta^2\right)t} V_{0_1}(R_0, \beta) V_{0_m}(r, \beta) \Omega_n(\beta) \cos\left(\frac{i\pi}{h}x\right) \cos\frac{i\pi}{h}\xi d\beta$$

- функції впливу крайової умови по координаті  $x$  (при  $x=h$ ):

$$W_{h, m_1}(t; r, \rho; x, h) = \frac{2}{\pi} \sum_{i=0}^{\infty} \int_0^{\infty} \varepsilon_i \frac{i\pi}{h^2} (-1)^{i+1} e^{-\left(D_h \left(\frac{i\pi}{R}\right)^2 + \beta^2\right)t} V_{0_{m_1}}(\rho, \beta) V_{0_m}(r, \beta) \Omega_n(\beta) \cos\left(\frac{i\pi}{h}x\right) d\beta$$

- функція впливу початкових умов та неоднорідностей системи:

$$H_{h, m_1}(t; r, \rho; x, \zeta) = \frac{2}{\pi h} \sum_{i=0}^{\infty} \int_0^{\infty} \varepsilon_i e^{-\left(D_R \left(\frac{i\pi}{R}\right)^2 + \beta^2\right)t} V_{0_{m_1}}(\rho, \beta) V_{0_m}(r, \beta) \cos\left(\frac{\pi i}{R}\zeta\right) \cos\left(\frac{\pi i}{R}x\right) d\beta$$

$m, m_1 = \overline{1, n+1}$

де структура  $V_{0_i}(r, \beta)$  визначена [75, 100] і має структуру, подібну до 3.29

### 3.4.3. Двовимірні моделі для прогнозування процесів дифузійного перенесення в багатоскладових середовищах з використанням інтегрального перетворення Бесселя і Фур'є

Постановка задачі: побудувати обмежений в області  $D_n = \{(t, r, z) : t \geq 0; r \in (0, R), z \in I_n\}$  розв'язок системи диференціальних рівнянь з частинними похідними 2-го порядку параболічного типу, що описує дифузійний перенос (молекулярний транспорт) в обмеженому  $(n+1)$ -складовому неоднорідному середовищі

$$\frac{\partial u_m(t, r, z)}{\partial t} = D_R \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) u_m(t, r, z) + D_m \frac{\partial^2 u_m(t, r, z)}{\partial z^2} + f_m(t, r, z), \quad z \in (l_{m-1}, l_m), m = \overline{1, n+1} \quad (3.55)$$

за початкових умов

$$u_m(t, r, z) \Big|_{t=0} = g_m(r, z), \quad z \in (l_{m-1}, l_m), m = \overline{1, n+1},$$

та крайових умов по радіальній змінній  $r$

$$\left. \frac{\partial}{\partial r} u_m(t, r, z) \right|_{r=r_0} = 0,$$

$$u_m(t, r, z) \Big|_{x=R} = u_{R_m}(t, z), \quad x \in (r_0, R), m = \overline{1, n+1}$$

крайових умов по змінній  $z$

$$\left. \frac{\partial}{\partial r} u_1(t, r, z) \right|_{z=0} = 0,$$

$$\left[ \alpha_{22}^{n+1} \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{22}^{n+1} \right] u_{n+1}(t, r, z) \Big|_{z=l} = g_l(t, r),$$

інтерфейсних умов

$$\left\{ \left[ \alpha_{j1}^m \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{j1}^m \right] u_{m+1}(t, r, z) - \left[ \alpha_{j2}^m \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{j2}^m \right] u_{m+1}(t, r, z) \right\} \Big|_{z=l_m} = 0; \quad j = \overline{1, 2}; \quad m = \overline{1, n}.$$

Тут  $D_R$  – коефіцієнт дифузії по координаті  $x$ ,  $D_m$  – коефіцієнти дифузії по координаті  $z$  для кожного з  $n$  шарів середовища. Умови тут подані в загальному вигляді і через вибір необхідних коефіцієнтів  $\alpha_{js}^m, \beta_{js}^m, j, s = \overline{1, 2}$  уточнюються

для кожної конкретної постановки моделі. Також є можливість враховувати і вплив просторово розподілених джерел маси  $f_m(t, z)$ .

До задачі (3.55) застосуємо послідовно інтегральні перетворення:

а) інтегральне перетворення Бесселя (Ганкеля) на сегменті  $(r_0, R)$  по радіальній  $r$ :

- інтегральний оператор прямої дії

$$B_0[u_m(t, r, z)] = \int_{r_0}^R u_m(t, r, z) V_R(r, \lambda_j) r dr \equiv u_{mj}(t, z); \quad (3.56)$$

-інтегральний оператор зворотної дії

$$B_0^{-1}[u_{mj}(t, z)] = \sum_{j=1}^{\infty} u_{mj}(t, z) \frac{V_0(r, \lambda_j)}{\|V_0(r, \lambda_j)\|^2} \equiv u_m(t, r, z), \quad (3.57)$$

де квадрат норми є  $\|V_0(r, \lambda_j)\|^2 = \int_{r_0}^R [V_0(r, \lambda_j)]^2 r dr$ ;

-основна тотожність інтегрального перетворення

$$B_0 \left[ \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) u_m(t, r, z) \right] = \int_{r_0}^R \left( \frac{\partial^2 u_m}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial u_m}{\partial r} \right) V_0(r, \lambda_j) r dr = -\lambda_j^2 u_{mj}(t, z) + \\ = -\lambda_j^2 u_{mj}(t, z) - \lambda_j R u_{Rm}(t, z) [N_0(\lambda_j, R) J_1(\lambda_j, R) - J_0(\lambda_j, R) N_1(\lambda_j, R)].$$

Тут  $V_0(r, \lambda_j)$ ,  $\lambda_j, j = \overline{0, \infty}$  – власні функції і власні числа інтегрального перетворення, де  $\{\lambda_j\}_0^{\infty}$  – монотонно зростаюча послідовність коренів трансцендентного рівняння [67, 74, 115]

$$N_0(\lambda R) J_1(\lambda r_0) - J_0(\lambda R) N_1(\lambda r_0) = 0.$$

Тут  $J_0(\lambda r)$ ,  $N_0(\lambda r)$  є функції Бесселя 1-го та 2-го роду порядку.

б) інтегральне перетворення Фур'є для обмеженого неоднорідного  $n+1$  – складового середовища по змінній  $z$ , визначеного в п. 3.2 [74, 98].

В результаті застосування відповідних інтегральних операторів (3.56), (3.8) до задачі(3.55) одержимо задачу Коші

$$\frac{d}{dt} u_{ki}(t) = -(D_R \lambda_j + \beta_k^2) u_{kj}(t) + F_{kj}(\tau)$$

$$u_{kj}(t)|_{t=0} = g_{kj}$$

розв'язком якої є функція [74, 100]

$$u_{kj}(t) = e^{-(D_R \lambda_j^2 + \beta_k^2)t} g_{kj} + \int_0^t e^{-(D_R \lambda_j^2 + \beta_m^2)(t-\tau)} F_{kj}(\tau) d\tau,$$

$$\text{де } F_{kj}(t) = g_{kj} + \Phi_{1_{kj}}(t) + \Phi_{2_{kj}}(t) + f_{kj}(t),$$

$$\Phi_{1_{kj}}(t) = \lambda_j R u_{R_k}(t),$$

$$\Phi_{2_{kj}}(t) = D_{n+1} \frac{\sigma_{n+1}}{\alpha_{22}^{n+1}} V_{n+1}(l, \beta_k) u_{l_j}(t),$$

$$f_{ki}(t) = \sum_{m=1}^{n+1} f_{m_{ki}}(t), \quad g_{ki} = \sum_{m=1}^{n+1} g_{m_{ki}}(z).$$

Повертаючись до оригіналів, з послідовним застосуванням інтегральних операторів зворотної дії, визначеними формулами (3.58), (3.9), отримаємо розв'язок задачі (3.1) [74, 98]

$$\begin{aligned} u_m(t, r, z) = & \int_0^t \int_{r_0}^R W_{l_m}(t-\tau; r, \rho; z, l) u_l(\tau, \rho) \rho d\rho d\tau + \\ & + \int_0^t \sum_{m_1=1}^{n+1} \int_{l_{m_1-1}}^{l_{m_1}} W_{R_{m, m_1}}(t-\tau; r, R; z, \xi) u_{R_{m_1}}(\tau, \xi) \sigma_{m_1} d\xi d\tau + \\ & + \int_{r_0}^R \sum_{m_1=0}^{n+1} \int_{l_{m_1-1}}^{l_{m_1}} H_{m, m_1}(t; r, \rho; z, \xi) g_{m_1}(\rho, \xi) \sigma_{m_1} d\xi \rho d\rho + \\ & + \int_0^t \int_{r_0}^R \sum_{m_1=0}^{n+1} \int_{l_{m_1-1}}^{l_{m_1}} H_{m, m_1}(t-\tau; r, \rho; z, \xi) f_{m_1}(\tau, \rho, \xi) \sigma_{m_1} d\xi \rho d\rho d\tau, \quad m = \overline{1, n+1}. \end{aligned}$$

У цій формулі визначені функції впливу, які описуються наступними виразами:

- функції впливу крайових умов по просторовій змінній z:

$$W_{l_m}(t; r, \rho; z, l) = D_{n+1} \frac{\sigma_{n+1}}{\alpha_{22}^1} \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} e^{-(D_R \lambda_j^2 + \beta_m^2)t} \frac{V_{n+1}(l, \beta_k) V_m(z, \beta_k) V_0(\rho, \lambda_j) V_0(r, \lambda_j)}{\|V(z, \beta_k)\|^2 \|V_0(r, \lambda_j)\|^2},$$

- функції впливу крайових умов по радіальній змінній  $r$ :

$$W_{R,m,m_1}(t; x, R; z, \xi) = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} e^{-(D_R \lambda_j^2 + \beta_k^2)t} \frac{V_{m_1}(\xi, \beta_k) V_m(z, \beta_k) V_0(R, \lambda_j) V_0(r, \lambda_j)}{\|V(z, \beta_k)\|^2 \|V_0(r, \lambda_j)\|^2},$$

- функція впливу початкових умов та неоднорідностей системи:

$$H_{m,m_1}(t; r, \rho; z, \xi) = \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{m_1=1}^{\infty} e^{-(D_R \lambda_j^2 + \beta_k^2)t} \frac{V_m(z, \beta_k) V_{m_1}(\xi, \beta_m) V_0(\rho, \lambda_j) V_0(r, \lambda_j)}{\|V(z, \beta_m)\|^2 \|V_0(r, \lambda_j)\|^2},$$

$m, m_1 = \overline{1, n+1}$

### 3.5. Моделювання процесів дифузійного переносу в тонких нанокompозитах із використанням інтегрального перетворення типу Конторовича-Лебедева

Враховуючи складні механізми масопереносу та взаємодії мікрошарів в різних мультикомпонентних середовищах, виходячи із аналізу концентраційних полів, отриманих експериментальним шляхом для різних технологічних застосувань (магнітні наноплівки, оксидні багатошарові середовища а інші), нами виконано певні узагальнення підходів, викладених в п. 3.2. – 3.5.

З метою отримання аналітичних описів концентраційних полів для кожної із дифундованих компонент на кожному з досліджуваних мікрошарів, залежних від часу, а також з врахуванням зміни коефіцієнтів дифузії на кожному з мікрошарів (що підтверджено багаточисельними експериментальними даними) запропоновано для побудови таких моделей переносу та отримання їх аналітичних розв'язків інтегральні перетворення Конторовича-Лебедева [71, 72, 130 – 135]. Останні, виходячи з їх властивостей, більш гнучкіше описують залежності концентрацій та внутрішніх параметрів кінетики по кожному шарі мультикомпонентів, як функцій від геометричної координати.

### 3.5.1. Моделі процесів дифузійного перенесення в однорідних обмежених середовищах з використанням інтегрального перетворення типу Конторовича-Лебедева

Побудуємо обмежений в області  $D = \{(t, r) : t \in (0 : \infty), r \in [R_0, R_1]; R_0 > 0, R_1 < \infty\}$  розв'язок диференціального рівняння дифузії

$$\frac{du}{dt} - a^2 B_\alpha[u] = f(t, r), \quad (3.58)$$

$$B_\alpha = r^2 \frac{d^2}{dr^2} + (2\alpha + 1)r \frac{d}{dr} + \alpha^2 - \lambda^2 r^2, 2\alpha + 1 \geq 0, \lambda \in (0, \infty) \quad (3.59)$$

за нульовою початковою умовою і крайовими умовами

$$\left[ (\alpha_{11}^0 + \delta_{11}^0) \frac{\partial}{\partial r} + \beta_{11}^0 + \gamma_{11}^0 \frac{\partial}{\partial t} \right] u(t, r) \Big|_{r=R_0} = g_0(t), \quad (3.60)$$

$$\left[ (\alpha_{11}^1 + \delta_{11}^1) \frac{\partial}{\partial r} + \beta_{11}^1 + \gamma_{11}^1 \frac{\partial}{\partial t} \right] u(t, r) \Big|_{r=R_1} = g_1(t).$$

Застосувавши до задачі дифузії (3.58-3.60) оператор  $H_n$ , внаслідок основної тотожності (3.16) одержуємо задачу Коші:

$$\frac{du_n}{dt} + a^2 \beta_n^2 u_n = f_n(t) + a^2 \frac{sh \pi \beta_n}{\pi \lambda^{2\alpha}} \left[ \frac{X_{\alpha;11}^{01}(\lambda R_0, \beta_n)}{X_{\alpha;11}^{11}(\lambda R_1, \beta_n)} g_1(t) - g_0(t) \right]. \quad (3.61)$$

Безпосередньо перевіряється, що розв'язком задачі Коші (3.61) є функція

$$u_n = \int_0^t e^{-(a^2 \beta_n^2)(t-\tau)} \left[ f_n(\tau) + a^2 \frac{sh \pi \beta_n}{\pi \lambda^{2\alpha}} \left[ \frac{X_{\alpha;11}^{01}(\lambda R_0, \beta_n)}{X_{\alpha;11}^{11}(\lambda R_1, \beta_n)} g_1(\tau) - g_0(\tau) \right] \right] d\tau$$

Тут:

$$C_\alpha(r, \beta) = I_{i\beta, \alpha}(r) + iD_\alpha(r, \beta), D_\alpha(r, \beta) = \pi^{-1} sh \pi \beta K_{i\beta, \alpha}(r);$$

$$X_{jk}^{m1}(\lambda R_m, \beta) = \left( \tilde{\alpha}_{jk}^m \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{jk}^m \right) C_\alpha(\lambda r, \beta) \Big|_{r=R_m}; \tilde{\alpha}_{jk}^m = \alpha_{jk}^m - \delta_{jk}^m \beta^2,$$

$$X_{jk}^{m2}(\lambda R_m, \beta) = \left( \tilde{\alpha}_{jk}^m \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{jk}^m \right) D_\alpha(\lambda r, \beta) \Big|_{r=R_m}; \tilde{\beta}_{jk}^m = \beta_{jk}^m - \gamma_{jk}^m \beta^2, m = 0, 1;$$

Застосувавши до функції  $u_n(t)$  оператор  $H_n^{-1}$  за правилом (3.62), після низки елементарних перетворень отримуємо єдиний розв'язок змішаної крайової задачі дифузії

$$u(t, r) = \int_0^t \int_{R_0}^{R_1} H_\alpha(t - \tau, r, \rho) f(\tau, \rho) \rho^{2\alpha-1} d\rho d\tau + \int_0^t [W_\alpha^0(t - \tau, r) g_0(\tau) + W_\alpha^1(t - \tau, r) g_1(\tau)] d\tau$$

Тут:

– функція впливу, породжена неоднорідністю рівняння,

$$H_\alpha(t, r, \rho) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-(a^2 \beta_n^2) t} V_\alpha(r, \beta_n) \frac{V_\alpha(\rho, \beta_n)}{\|V_\alpha(r, \beta_n)\|^2};$$

– функції впливу крайових умов (функції Гріна)

- породжена крайовою умовою по межі  $r = R_0$

$$W_\alpha^0(t, r) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-(a^2 \beta_n^2) t} a^2 \frac{sh \pi \beta_n}{\pi \lambda^{2\alpha}} \frac{V_\alpha(r, \beta_n)}{\|V_\alpha(r, \beta_n)\|^2}$$

- породжена крайовою умовою по межі  $r = R_1$

$$W_\alpha^1(t, r) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-(a^2 \beta_n^2) t} a^2 \frac{sh \pi \beta_n}{\pi \lambda^{2\alpha}} \frac{X_{\alpha;11}^{01}(\lambda R_0, \beta_n)}{X_{\alpha;11}^{11}(\lambda R_1, \beta_n)} \frac{V_\alpha(r, \beta_n)}{\|V_\alpha(r, \beta_n)\|^2};$$

– квадрат норми спектральної функції

$$\|V_\alpha(r, \beta_n)\|^2 = \frac{sh^2 \pi \beta_n}{\lambda^{2\alpha} \pi^2} \frac{X_{\alpha;11}^{01}(\lambda R_0, \beta_n)}{X_{\alpha;11}^{11}(\lambda R_1, \beta_n)} \frac{d}{dp} \Delta_\alpha(p) \Big|_{p=\beta^2 \exp \pi i}$$

Ряд Фур'є  $g(r) = \sum_{n=1}^{\infty} \int_{R_0}^{R_1} g(\rho) V_\alpha(\rho, \beta_n) \rho^{2\alpha-1} d\rho \frac{V_\alpha(r, \beta_n)}{\|V_\alpha(r, \beta_n)\|^2}$  визначає пряме  $H_n$  та

обернене  $H_n^{-1}$  скінченне інтегральне перетворення типу Конторовича-Лебедева на сегменті  $[R_0, R_1]$ :

$$H_n[g(r)] = \int_{R_0}^{R_1} g(r) V_\alpha(r, \beta_n) r^{2\alpha-1} dr \equiv g_n, \quad (3.62)$$

$$H_n^{-1}[g(r)] = \sum_{n=1}^{\infty} g_n \frac{V_\alpha(r, \beta_n)}{\|V_\alpha(r, \beta_n)\|^2} \equiv g(r).$$

Оскільки  $\Delta_\alpha(-\beta^2) = \pi (sh \pi \beta)^{-1} \delta_\alpha(\beta)$  і  $\frac{d}{dp} = \frac{d}{d(-\beta^2)} = -\frac{d}{2\beta d\beta}$ , то



$$\left. \frac{d\Delta_\alpha(p)}{dp} \right|_{p=-\beta_n^2} = \left[ -\frac{d}{2\beta d\beta} \pi (sh \pi \beta)^{-1} \delta_\alpha(\beta) \right]_{\beta=\beta_n} = \frac{\pi}{2\beta_n sh \pi \beta_n} \left( \left. \frac{d\delta_\alpha(\beta)}{d\beta} \right|_{\beta=\beta_n} \right)$$

Ввівши позначення  $\delta_\alpha^*(\beta) = \frac{\pi}{sh \pi \beta} \delta_\alpha(\beta)$  рівність для обчислення квадрата

норми власної функції набуває вигляду:

$$\|V_\alpha(r, \beta_n)\|^2 = \frac{sh \pi \beta_n}{2\pi \lambda^{2\alpha} \beta_n} \frac{X_{\alpha;11}^{01}(\lambda R_0, \beta_n)}{X_{\alpha;11}^{11}(\lambda R_1, \beta_n)} \left[ \left. \frac{d\delta_\alpha^*(\beta)}{d\beta} \right|_{\beta=\beta_n} \right]$$

Дискретний спектр оператора  $V_\alpha$  утворюють корені  $\beta_n$  трансцендентного рівняння  $\delta_\alpha(\beta) = 0$ ,  $\delta_\alpha(\beta) = X_{\alpha;11}^{01}(\lambda R_0, \beta) X_{\alpha;11}^{12}(\lambda R_1, \beta) - X_{\alpha;11}^{02}(\lambda R_0, \beta) X_{\alpha;11}^{12}(\lambda R_1, \beta)$ .

Власні числа  $\beta_\alpha$  – дійсні, корені трансцендентного рівняння  $\delta_\alpha(\beta) = 0$  – прості, симетрично розташовані відносно точки  $\beta = 0$  та числа послідовність  $\{\beta_n\}_{n=1}^\infty$  монотонно зростає з єдиною граничною точкою  $\beta = \infty$ .

Обґрунтуванням інтегрального перетворення типу Конторовича-Лебедева в однорідних обмежених середовищах є наступна теорема [133].

Теорема (про основну тотожність). Якщо функція  $f(x) = B_\alpha(g(r))$  неперервна на  $[R_0; R_1]$ , а функція  $g(r)$  задовольняє крайові умови

$$(\tilde{\alpha}_{11}^0 \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{11}^0) g(r) \Big|_{r=R_0} = g_0,$$

$$(\tilde{\alpha}_{11}^1 \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{11}^1) g(r) \Big|_{r=R_1} = g_1,$$

то справджується основна тотожність інтегрального перетворення диференціального оператора Бесселя другого порядку  $B_\alpha$

$$H_n[B_{(\alpha)}[g(r)]] = -\beta_n^2 g_n + \frac{sh \pi \beta_n}{\pi \lambda^{2\alpha}} \left[ \frac{X_{\alpha;11}^{01}(\lambda R_0, \beta_n)}{X_{\alpha;11}^{11}(\lambda R_1, \beta_n)} g_1 - g_0 \right].$$

### 3.5.2. Моделі процесів дифузійного перенесення в двоскладових напівобмежених середовищах з використанням інтегрального перетворення типу Конторовича-Лебедєва

Побудуємо обмежений в області  $D_1^+ = \{(t, r) : t \in (0, \infty); r \in (0, R_1) \cup (R_1, \infty)\}$  розв'язок системи рівнянь переносу

$$\frac{\partial u_j}{\partial t} - a_j^2 B_{\alpha_j} [u_j] = f_j(t, r), r \in (R_{j-1}, R_j), j = 1, 2 \quad (3.63)$$

за початковими умовами

$$u_j(t, r)|_{t=0} = g_j(r), r \in (R_{j-1}, R_j), j = 1, 2, R_0 = 0, R_2 = \infty$$

та умовами спряження

$$\left\{ \left[ \left( \alpha_{j1}^1 + \delta_{j1}^1 \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial r} + \beta_{j1}^1 + \gamma_{j1}^1 \frac{\partial}{\partial t} \right] u_1(t, r) - \left[ \left( \alpha_{j2}^1 + \delta_{j2}^1 \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial r} + \beta_{j2}^1 + \gamma_{j2}^1 \frac{\partial}{\partial t} \right] u_2(t, r) \right\} \Big|_{r=R_1} = \omega_{j1}(t), j = 1, 2 \quad (3.64)$$

Внаслідок основної тотожності (3.134) одержуємо задачу Коші:

$$\left( \frac{d}{dt} + \beta^2 + \gamma_1^2 \right) \tilde{u}(t, \beta) = \tilde{F}(t, \beta), \tilde{u}(t, \beta)|_{t=0} = \tilde{g}(\beta) \quad (3.65)$$

Тут:

$$\tilde{F}(t, \beta) = \tilde{f}(t, \beta) + d_1 \left[ Z_{(\alpha);12}^1(\beta)(\omega_{21}(t) + \psi_{21}) - Z_{(\alpha);22}^1(\beta)(\omega_{11}(t) + \psi_{11}) \right]$$

$$Z_{(\alpha);i2}^1(\beta) = \left( \tilde{\alpha}_{i2}^1 \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{i2}^1 \right) V_{(\alpha);2}(r, \beta) \Big|_{r=R_1}, i = 1, 2; d_1 = \frac{R_1^{2\alpha_1+1}}{c_{11,1}}.$$

Розв'язком задачі Коші (3.65) є функція

$$\tilde{u}(t, \beta) = \int_0^t e^{-(\beta^2 + \gamma_1^2)(t-\tau)} \left[ \tilde{F}(\tau, \beta) + \tilde{g}(\beta) \delta_+(\tau) \right] d\tau, \quad (3.66)$$

де  $\delta_+(\tau)$  – дельта-функція, зосереджена в точці  $t=0+$ .

Якщо застосувати (за правилом множення матриць) операторну матрицю-

стовбець  $H_{(\alpha);1}^{-1} = \begin{bmatrix} \int_0^\infty \dots V_{(\alpha);1}(r, \beta) \Omega(\beta) d\beta \\ 0 \\ \int_0^\infty \dots V_{(\alpha);2}(r, \beta) \Omega(\beta) d\beta \end{bmatrix}$  до матриці-елемента  $[\tilde{u}(t, \beta)]$ , де функція

$\tilde{u}(t, \beta)$  визначена формулою (3.66), то в результаті елементарних перетворень одержимо єдиний розв'язок крайової задачі (3.63) – (3.64):

$$\begin{aligned}
u_m(t, r) &= \int_0^\infty \tilde{u}(t, r) V_{(\alpha);m}(r, \beta) \Omega_{(\alpha)}(r, \beta) d\beta = \\
&= \int_0^t \left[ \int_0^{R_1} H_{(\alpha);m1}(t-\tau, r, \rho) (f_1(\tau, \rho) + g_1(\rho) \delta_+(\tau)) \sigma_1 \rho^{2\alpha_1-1} d\rho + \right. \\
&+ \left. \int_{R_1}^\infty H_{(\alpha);m2}(t-\tau, r, \rho) (f_2(\tau, \rho) + g_2(\rho) \delta_+(\tau)) \sigma_2 \rho^{2\alpha_2-1} d\rho \right] d\tau + \\
&+ \int_0^t \left[ \mathfrak{R}_{(\alpha);i2}^{1m}(t-\tau, r) (\omega_{21}(\tau) + \psi_{21} \delta_+(t)) - \mathfrak{R}_{(\alpha);22}^{1m}(t-\tau, r) (\omega_{11}(\tau) + \psi_{11} \delta_+(t)) \right] d\tau, \quad m=1,2.
\end{aligned} \tag{3.67}$$

Тут:

$$\begin{aligned}
H_{(\alpha);mk}(t, r, \rho) &= \int_0^\infty e^{-(\beta^2 + \gamma_1^2)t} V_{(\alpha);m}(r, \beta) V_{(\alpha);k}(\rho, \beta) \Omega_{(\alpha)}(\beta) d\beta; \quad m, k=1,2 \\
\mathfrak{R}_{(\alpha);i2}^{1m}(t, r) &= \int_0^\infty e^{-(\beta^2 + \gamma_1^2)t} \left[ d_1 Z_{(\alpha);i2}^1(\beta) \right] V_{(\alpha);m}(r, \beta) \Omega_{(\alpha)}(\beta) d\beta; \quad i, m=1,2
\end{aligned}$$

Наведений приклад показує, що методом запровадженого інтегрального перетворення можна побудувати точний аналітичний розв'язок алгоритмічного характеру достатньо широкого класу задач дифузійного масопереносу та інших задач математичної фізики неоднорідних середовищ з нестационарними режимами переносу на границях і межах контакту. Інтегральне зображення

$$g(r) = \int_0^\infty V_{(\alpha)}(r, \beta) \Omega_{(\alpha)}(\beta) \int_0^\infty g(\rho) V_{(\alpha)}(\rho, \beta) \sigma_\alpha(\rho) d\rho d\beta \text{ визначає пряме}$$

$$H_{(\alpha);1}[g(r)] = \int_0^\infty g(r) V_{(\alpha)}(r, \beta) \sigma_{(\alpha)}(r) dr \equiv \tilde{g}(\beta) \tag{3.68}$$

і обернене

$$H_{(\alpha);1}^{-1}[\tilde{g}(\beta)] = \int_0^\infty \tilde{g}(\beta) V_{(\alpha)}(r, \beta) \Omega_{(\alpha)}(\beta) d\beta \equiv g(r) \tag{3.69}$$

інтегральне перетворення типу Конторовича-Лебєдева для двоскладового напівобмеженого середовища.

Обґрунтуванням інтегрального перетворення типу Конторовича-Лебедева в напівобмежених двоскладових середовищах є наступна теорема.

Теорема (про основну тотожність). Якщо вектор-функція  $f(r) = \{B_{\alpha_1}[g_1(r)]; B_{\alpha_2}[g_2(r)]\}$  неперервна на множині  $I_1^+$ , а вектор-функція  $g(r)$  задовольняє умови обмеження

$$\lim_{r \rightarrow 0} r^{2\alpha_1+1} \left( g_1 \check{V}_{(\alpha);1} - g_1 V_{(\check{\alpha});1} \right) = 0, \quad \lim_{r \rightarrow 0} r^{2\alpha_2+1} \left( g_2 \check{V}_{(\alpha);2} - g_2 V_{(\check{\alpha});2} \right) = 0$$

та умови спряження

$$\left[ \left( \tilde{\alpha}_{j1}^1 \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{j1}^1 \right) g_1(r) - \left( \tilde{\alpha}_{j2}^1 \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{j2}^1 \right) g_2(r) \right] \Big|_{r=R_1} = \omega_{j1}, \quad j=1,2,$$

то справджується основна тотожність інтегрального перетворення диференціального оператора  $B_{(\alpha)}$ :

$$\begin{aligned} H_{(\alpha);1} \left[ B_{(\alpha)} [g(r)] \right] &= -\beta^2 \tilde{g}(\beta) - k_1^2 \int_0^{R_1} g_1(r) V_{(\alpha);1}(r, \beta) \sigma_1 r^{2\alpha_1-1} dr - \\ &- k_2^2 \int_{R_1}^{\infty} g_2(r) V_{(\alpha);2}(r, \beta) \sigma_2 r^{2\alpha_2-1} dr + \\ &+ \frac{R_1^{2\alpha_1+1}}{c_{11,1}} \left[ \left( \tilde{\alpha}_{12}^1 \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{12}^1 \right) V_{(\alpha);2}(r, \beta) \Big|_{r=R_1} \omega_{21} - \left( \tilde{\alpha}_{22}^1 \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{22}^1 \right) V_{(\alpha);2}(r, \beta) \Big|_{r=R_1} \omega_{11} \right]. \end{aligned}$$

### 3.5.3. Моделі процесів дифузійного перенесення в обмежених двоскладових середовищах з використанням інтегрального перетворення типу Конторовича-Лебедева, Лежандра ( $KL1 * L2$ )

Побудуємо обмежений в області  $D = \{(t, r) : t \in (0, \infty), r \in I_1 = (0, R_1) \cup (R_1, R_2), 0 < R_1 < R_2 < \infty\}$  розв'язок сепаратної системи рівнянь переносу

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} + \gamma_1^2 u_1 - a_1^2 B_{\alpha} [u_1] = 0, \quad r \in (0, R_1)$$

$$\frac{\partial u_2}{\partial t} + \gamma_2^2 u_2 - a_2^2 \Lambda_{(\mu)} [u_2] = 0, \quad r \in (R_1, R_2) \quad (3.70)$$

за початковими умовами

$u_1|_{t=0} = g_1(r), r \in (0, R_1), u_2|_{t=0} = g_2(r), r \in (R_1, R_2)$ , крайовими умовами

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial r} [r^\alpha u_1] = 0, \left[ \left( \alpha_{22}^2 + \delta_{22}^2 \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial r} + \beta_{22}^2 + \gamma_{22}^2 \frac{\partial}{\partial t} \right] u_2 \Big|_{r=R_2} = 0$$

та умовами спряження:

$$\left\{ \left[ \left( \alpha_{j1}^1 + \delta_{j1}^1 \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial r} + \beta_{j1}^1 + \gamma_{j1}^1 \frac{\partial}{\partial t} \right] u_1(t, r) - \left[ \left( \alpha_{j2}^1 + \delta_{j2}^1 \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial r} + \beta_{j2}^1 + \gamma_{j2}^1 \frac{\partial}{\partial t} \right] u_2(t, r) \right\} \Big|_{r=R_1} = 0, j=1,2$$

Припустимо, шукана вектор-функція  $u(t, r) = \{u_1(t, r), u_2(t, r)\}$  є оригіналом за Лапласом щодо  $t$  [60]. У зображенні за Лапласом задачі (3.70) відповідає крайова задача: побудувати обмежений на множині  $I_I$  розв'язок системи звичайних диференціальних рівнянь

$$\begin{aligned} (B_{\nu_1, \alpha} - \lambda^2) u_1^*(p, r) &= -\bar{g}_1(r), r \in (0, R_1) \\ (\Lambda_{(\mu)} - q_2^2) u_2^*(p, r) &= -\bar{g}_2(r), r \in (R_1, R_2) \end{aligned} \quad (3.71)$$

За крайовими умовами

$$\left( \bar{\alpha}_{22}^2 \frac{d}{dr} + \bar{\beta}_{22}^2 \right) u_2^* \Big|_{r=R_2} = \omega_2, \quad \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial r} [r^\alpha u_1^*] = 0$$

Та умовами спряження

$$\left[ \left( \bar{\alpha}_{j1}^1 \frac{d}{dr} + \bar{\beta}_{j1}^1 \right) u_1^*(r) - \left( \bar{\alpha}_{j2}^1 \frac{d}{dr} + \bar{\beta}_{j2}^1 \right) u_2^*(r) \right] \Big|_{r=R_1} = \omega_{j1} - \omega_{j2}, \quad j=1,2.$$

Тут:  $\bar{\alpha}_{jm}^k = \alpha_{jm}^k + p\delta_{jm}^k, \bar{\beta}_{jm}^k = \beta_{jm}^k + p\gamma_{jm}^k; c_{j1}^*(p) = \bar{\alpha}_{2j}^1 \bar{\beta}_{1j}^1 - \bar{\alpha}_{1j}^1 \bar{\beta}_{2j}^1 = c_{j1,1}$  ;

$$\bar{g}_1(r) = a_1^{-2} r^{-2} g_1(r), \quad \bar{g}_2(r) = a_2^{-2} g_2(r), \quad q_j = a_j^{-1} (p + \gamma_j^2)^{\frac{1}{2}}; \quad \operatorname{Re} q_j > 0 ;$$

$$B_{\nu_1, \alpha} = \frac{d^2}{dr^2} + \frac{(2\alpha + 1)}{r} \frac{d}{dr} + \frac{\nu_1^2 - \alpha^2}{r^2}; \quad \nu_1 \equiv q_1, \nu_2 = -\frac{1}{2} + q_2; \quad u^*(p, r) = \int_0^\infty u(t, r) e^{-pt} dt ;$$

$$\omega_{jm} = \delta_{jm}^1 g'_m(R_m) + \gamma_{jm}^1 g_m(R_m), \quad m=1,2, j=1,2;$$

$$\omega_2 = \delta_{22}^2 g'_2(R_2) + \gamma_{22}^2 g_2(R_2).$$

Єдиний розв'язок крайової задачі [73]:

$$u_j^*(p, r) = \int_0^{R_1} H_{(\alpha);j1}^*(p, r, \rho) \overline{g_1(\rho)} \rho^{2\alpha_1-1} d\rho + \int_{R_1}^{R_2} H_{(\alpha);j2}^*(p, r, \rho) \overline{g_2(\rho)} \rho^{2\alpha_2-1} d\rho; \quad j=1,2.$$

$$\text{Тут: } \Psi_{v_1, \alpha; 11}^{1*}(\lambda R_1, \lambda x) = U_{v_1, \alpha; 11}^{11}(\lambda R_1) K_{v_1, \alpha}(\lambda x) - U_{v_1, \alpha; 11}^{12}(\lambda R_1) I_{v_1, \alpha}(\lambda x);$$

$$U_{v, \alpha; j1}^{11}(\lambda R_1) = \left( \overline{\alpha}_{j1}^1 \frac{d}{dr} + \overline{\beta}_{j1}^1 \right) I_{v_1, \alpha}(\lambda r) \Big|_{r=R_1} \equiv \left( \overline{\alpha}_{j1}^1 \frac{v_1 - \alpha}{R_1} + \overline{\beta}_{j1}^1 \right) I_{v_1, \alpha}(\lambda R_1) + \overline{\alpha}_{j1}^m \lambda^2 R_1 I_{1^{v+1}, \alpha+1}(\lambda R_1)$$

$$U_{v, \alpha; j1}^{12}(\lambda R_1) = \left( \overline{\alpha}_{j1}^1 \frac{d}{dr} + \overline{\beta}_{j1}^1 \right) K_{v_1, \alpha}(\lambda r) \Big|_{r=R_1} \equiv \left( \overline{\alpha}_{j1}^1 \frac{v_1 - \alpha}{R_1} + \overline{\beta}_{j1}^1 \right) K_{v_1, \alpha}(\lambda R_1) + \overline{\alpha}_{j1}^m \lambda^2 R_1 K_{1^{v+1}, \alpha+1}(\lambda R_1)$$

$$\Delta_{v_2; 12}^{(\mu)}(chR_1, chR_2) = Z_{v_2; j2}^{(\mu); 11}(chR_1) Z_{v_2; 22}^{(\mu); 22}(chR_2) - Z_{v_2; j2}^{(\mu); 12}(chR_1) Z_{v_2; 22}^{(\mu); 21}(chR_2);$$

$$F_{v_2; 1k}^{(\mu); m}(chR_m, chx) = Z_{v_2; jk}^{(\mu); m1}(chR_m) L_{v_2}^{(\mu)}(chx) - Z_{v_2; jk}^{(\mu); m2}(chR_m) P_{v_2}^{(\mu)}(chx);$$

$$Z_{v_2; jk}^{(\mu); m1}(chR_m) = \left( \overline{\alpha}_{jk}^1 \frac{d}{dr} + \overline{\beta}_{jk}^1 \right) P_{v_2}^{(\mu)}(chr) \Big|_{r=R_m};$$

$$Z_{v_2; jk}^{(\mu); m2}(chR_m) = \left( \overline{\alpha}_{jk}^1 \frac{d}{dr} + \overline{\beta}_{jk}^1 \right) L_{v_2}^{(\mu)}(chr) \Big|_{r=R_m};$$

$$B_{(\mu)}(q_2) = \frac{1}{2} \pi 2^{\mu_1 - \mu_2} \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} + q_2 - v^+\right) \Gamma\left(\frac{1}{2} + q_2 - v^-\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2} + q_2 + v^+\right) \Gamma\left(\frac{1}{2} + q_2 + v^-\right)}, \quad v^\pm = \frac{1}{2}(\mu_1 \pm \mu_2);$$

$$H_{\alpha, (\mu); 11}^*(p, r, \rho) = \frac{\lambda_1^{2\alpha_1}}{\Delta_{\alpha, (\mu)}^*(p)} \left\{ \begin{aligned} & I_{v_1, \alpha}(\lambda r) [\Delta_{v_2, 12}^{(\mu)}(chR_1, chR_2) \Psi_{v_1, \alpha; 21}^{1*}(\lambda R_1, \lambda \rho) - \\ & I_{v_1, \alpha}(\lambda \rho) [\Delta_{v_2, 12}^{(\mu)}(chR_1, chR_2) \Psi_{v_1; 21}^{1*}(\lambda R_1, \lambda r) - \\ & - \Delta_{v_2; 22}^{(\mu)}(chR_1, chR_2) \Psi_{v_2, \alpha; 11}^{1*}(\lambda R_1, \lambda_1 \rho)], 0 < r < \rho < R_1; \\ & - \Delta_{v_2; 22}^{(\mu)}(chR_1, chR_2) \Psi_{v_2, \alpha; 11}^{1*}(\lambda R_1, \lambda_1 r)], 0 < \rho < r < R_1 \end{aligned} \right\};$$

$$H_{\alpha, (\mu); 12}^*(p, r, \rho) = -\frac{c_{21}^*(p) I_{v_1, \alpha}(\lambda_1 r)}{shR_1 \Delta_{\alpha, (\mu)}^*(p)} F_{v_2; 22}^{(\mu); 2}(chR_2, ch\rho);$$

$$H_{\alpha, (\mu); 21}^*(p, r, \rho) = -\frac{c_{11}^*(p) I_{v_1, \alpha}(\lambda_1 \rho)}{R_1^{2\alpha+1} \Delta_{\alpha, (\mu)}^*(p)} F_{v_2; 22}^{(\mu); 2}(chR_2, chr);$$

$$H_{\alpha(\mu); 22}^*(p, r, \rho) = \frac{B_{(\mu)}(q_2)}{\Delta_{\alpha, (\mu)}^*(p)} \left\{ \begin{aligned} & F_{v_2; 22}^{(\mu); 2}(chR_2, ch\rho) [U_{v_1, \alpha; 21}^{11}(\lambda R_1) F_{v_2; 12}^{(\mu); 1}(chR_1, chr) - \\ & F_{v_2; 22}^{(\mu); 2}(chR_2, chr) [U_{v_1, \alpha; 21}^{11}(\lambda R_1) F_{v_2; 12}^{(\mu); 1}(chR_1, ch\rho) - \\ & - U_{v_1, \alpha; 11}^{11}(\lambda R_1) F_{v_2; 22}^{(\mu); 1}(chR_1, chr)], R_1 < r < \rho < R_2 \\ & - U_{v_1, \alpha; 11}^{11}(\lambda R_1) F_{v_2; 22}^{(\mu); 1}(chR_1, ch\rho)], R_1 < \rho < r < R_2 \end{aligned} \right\}.$$

### Інтегральне зображення

$$g(r) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} V_{\alpha,(\mu)}(r, \beta) \Omega_{\alpha,(\mu)}(\beta) \int_0^{R_2} g(\rho) V_{\alpha,(\mu)}(\rho, \beta) \sigma(\rho) d\rho d\beta$$

визначає пряме  $H_{\alpha,(\mu)}$  і обернене  $H_{\alpha,(\mu)}^{-1}$  узагальнене гібридне інтегральне перетворення типу (Конторовича–Лебедєва) 1-го роду – Лежандра 2-го роду:

$$H_{\alpha,(\mu)}[g(r)] = \int_0^{R_2} g(r) V_{\alpha,(\mu)}(r, \beta) \sigma(r) dr \equiv \tilde{g}(\beta) \quad (3.72)$$

$$H_{\alpha,(\mu)}^{-1}[\tilde{g}(\beta)] = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \tilde{g}(\beta) V_{\alpha,(\mu)}(r, \beta) \Omega_{\alpha,(\mu)}(\beta) d\beta \equiv g(r) . \quad (3.73)$$

Обґрунтуванням інтегрального перетворення типу Конторовича–Лебедєва, Лежандра у двоскладових середовищах є наступна теорема. [72]

Теорема (про основну тотожність). Якщо вектор-функція  $g(r)$  належить області визначення гібридного диференціального оператора  $M_{\alpha,(\mu)}$ , то справджується основна тотожність інтегрального перетворення гібридного диференціального оператора  $M_{\alpha,(\mu)}$ :

$$H_{\alpha,(\mu)}[M_{\alpha,(\mu)}[g(r)]] = -\beta^2 \tilde{g}(\beta) + a_2^2 \sigma_2 sh R_2 (\tilde{\alpha}_{22}^2)^{-1} V_{\alpha,(\mu);2}(R_2, \beta) \left( \tilde{\alpha}_{22}^2 \frac{d\tilde{g}_2}{d\beta} + \tilde{\beta}_{22}^2 \tilde{g}_2 \right) \Big|_{\beta=R_2} -$$

$$-k_1^2 \int_0^{R_1} g_1(r) V_{\alpha,(\mu);1}(r, \beta) \sigma_1 r^{2\alpha-1} dr - k_2^2 \int_{R_1}^{R_2} g_2(r) V_{\alpha,(\mu);2}(r, \beta) \sigma_2 sh r dr.$$

## РОЗДІЛ 4.

### МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ДИФУЗІЙНОГО ПЕРЕНЕСЕННЯ В БАГАТОШАРОВИХ НАНОПЛІВКАХ РІЗНОЇ КОНФІГУРАЦІЇ

Даний розділ присвячено застосуванню розробленої у попередньому розділі методології для математичного моделювання дифузійного переносу в багатошарових Fe/Tb, Dy/Fe магнітних та оксидних наноплівках зокрема, обґрунтовано розв'язність відповідних задач та отримано їх аналітичний розв'язок, що в узагальненому вигляді описує вплив фізичних чинників внутрішньої кінетики переносу. Виконано числове моделювання дифузійного переносу та проведена перевірка на адекватність моделі за результатами натурних експериментів. Результати опубліковані в роботах [4, 5, 6, 44, 72, 113, 136] та апробовані на конференціях [95, 137, 138].

#### **4.1. Математичне моделювання дифузійного переносу в багатошарових Fe/Dy – магнітних наноплівках різної конфігурації**

##### **4.1.1. Фізична задача і математична модель процесу дифузії в багатошарових системах.**

Даний підрозділ стосується дослідження (Fe/Dy) магнітних багатошарових наноплівок, експериментальні концентраційні профілі яких були одержані при допомозі томографічно-атомного аналізу (Fe 4нм/Dy 3нм). Припускається, що пост-депозиційна дифузія впливає більше на хімічне змішування на інтерфейсах, яке є доступним для дослідження за допомогою депозиційних методик, таких як термальне випарювання. Профілі коефіцієнтів дифузії для Fe і Dy одержані шляхом розв'язання зворотної задачі переносу.

Методи інтегральних перетворень Фур'є, Лапласа, Фур'є-Бесселя, Вебера, Ганкеля і Гілберта є найбільш вживані для відшукування розв'язків задач переносу в однорідних системах. Теорія інтегральних гібридних перетворень і їх застосування для моделювання переносу була розвинута М.П.Ленюком та М.Р.Петриком в [63-79, 99-106]. До структури диференціальних операторів Фур'є, Бесселя, Вебера і Ганкеля було додано крайові умови та умови контактні



для створення єдиних перетворень для необмеженої, напівобмеженої і обмеженої неоднорідної системи.

Розглядається багатошарове (складається з  $n$  подвійних шарів Fe/Dy) середовище. Як техніка підготовки, так і процес дифузії між суміжними шарами приводять до хімічного змішування на межах контакту. Схематизація такого середовища представлена на рис.4.1.

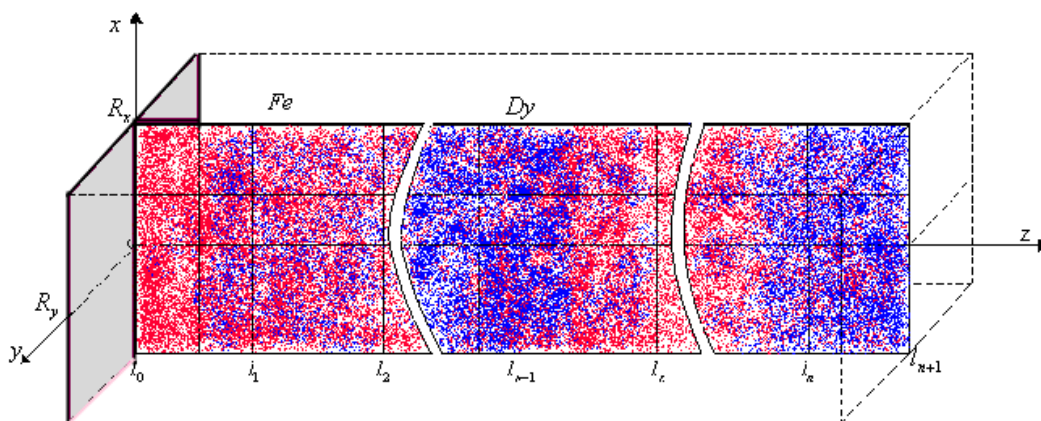


Рис.4.1. Схематичний вигляд плоского багатошарового середовища

Припустивши, що процес дифузії атомів Fe і Dy – головна причина змішування системи, концентраційні профілі для такої багатошарової системи можна одержати з рівнянь Фіка, в комбінації з крайовими умовами зовнішніх шарів і умовами контакту між послідовними шарами.

Запропоновано нову математичну модель процесу переносу шляхом дифузії в плоскому багатошаровому середовищі. Значення місцевої миттєвої концентрації  $C_k(t, x, z)$  атомів Fe (або Dy) – визначається при  $t \rightarrow \infty$  як розв'язок наступної системи диференціальних рівнянь другого порядку:

$$\frac{\partial}{\partial t} C_k(t, x, z) = D_0 \frac{\partial^2 C_k}{\partial x^2} + D_{z_k} \frac{\partial^2 C_k}{\partial z^2} \quad (4.1)$$

$$\text{в області } I_n = \left\{ t > 0, x \in (0, R), z : z \in \bigcup_{k=1}^{n+1} (l_{k-1}, l_k); l_0 \geq 0; l_{n+1} = \infty \right\},$$

де  $D_k$  - коефіцієнти дифузії елементу,  $C_k, k = \overline{1, n+1}$  – Fe (чи Dy) концентрації в  $k$ -му шарі багатошарового середовища вздовж осі  $z$ ;  $x, y, z$  – просторові координати;  $t$  – час,  $D_k, k = \overline{1, n+1}$  – коефіцієнт дифузії в напрямку осі  $z$ ;  $D_0$  –

коефіцієнт дифузії в напрямку осі  $x$ ;  $\Delta l_k = l_k - l_{k-1}$ ;  $k = \overline{1, n+1}$  — товщина  $k$ -го шару;  $l = l_{n+1} - l_0$  — товщина середовища;  $R$  — півширина плівки.

Відповідні початкові умови мають вигляд:

$$C_k(t, x, z)|_{t=0} = C_{0k}(x, z) \equiv C_{0k}(z), \quad k = \overline{1, n}. \quad (4.2)$$

Крайові умови по змінній  $z$ :

$$\left[ \alpha_{11}^0 \frac{d}{dz} + \beta_{11}^0 \right] C_1(t, x, z)|_{z=l_0} = C_{l_0}(t, x); \quad \frac{\partial C_{n+1}}{\partial z}|_{z=\infty} = 0. \quad (4.3)$$

Інтерфейсні умови між суміжними шарами вздовж осі  $z$ :

$$\begin{aligned} [C_k - C_{k+1}]_{z=l_k} &= 0; \\ \left[ \frac{\partial}{\partial z} C_k - \xi_k \frac{\partial}{\partial z} C_{k+1} \right]_{z=l_k} &= 0; \quad k = \overline{1, n}, \quad \text{де } \xi_k = \frac{D_{k+1}}{D_k}. \end{aligned}$$

Крайові умови по змінній  $x$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_k}{\partial x}|_{x=0} &= 0, \\ C_k|_{x=R} &= C_{1k}(t, z). \end{aligned} \quad (4.4)$$

Це – класичні умови, оскільки ми вважаємо що досліджена область є півплита, паралельна до  $(x, z)$  площини, як зображено на рис.4.16.

Точний аналітичний розв'язок задачі, описаної рівняннями (4.1) – (4.3), можна знайти шляхом застосування інтегральних перетворень Фур'є. Такий розв'язок дозволить визначити профілі коефіцієнтів дифузії для Fe і Ду з експериментальних даних.

Інтегральне перетворення Фур'є визначається наступними операторами [75, 72]:

а) Інтегральне перетворення косинус-Фур'є по змінній  $x$ :

- інтегральний оператор прямої дії:

$$F_c [C_k(t, x, z)] = \int_0^R C_k(t, x, z) \cdot \mathcal{G}(x, \eta_m) dx = \int_0^R C_k(t, x, z) \cdot \cos \eta_m x dx \equiv C_{km}(t, z); \quad (4.5)$$

- інтегральний оператор зворотної дії

$$F_c^{-1}[C_{km}(t, z)] = \sum_{m=0}^{\infty} C_{km}(t, z) \frac{\mathcal{G}(x, \eta_m)}{\|\mathcal{G}(x, \eta_m)\|^2} = \frac{2}{R} \sum_{m=0}^{\infty} C_{km}(t, z) \cdot \cos \eta_m x \equiv C_k(t, x, z); \quad (4.6)$$

- основна тотожність інтегрального перетворення Фур'є для диференціального оператора Лапласа:

$$F_c \left[ \frac{\partial C_k}{\partial x^2} \right] = \int_0^R \frac{\partial^2}{\partial x^2} C_k \cdot \mathcal{G}(x, \eta_m) dx = -\eta_m^2 C_{km}(t, z) + (-1)^m \eta_m \cdot C_{1k}(t, z), \quad (4.7)$$

де  $\mathcal{G}(x, \eta_m) = \cos \eta_m x$ ,  $\eta_m = \frac{2m+1}{2R} \pi$ ,  $m = \overline{0, \infty}$  спектральна функція і спектральні числа інтегрального перетворення;

b) n-складове інтегральне перетворення Фур'є по змінній z:

- інтегральний оператор прямої дії:

$$F_{+,n}[C_k(t, z)] = \int_{l_{k-1}}^{l_k} C_k(t, z) V_k(z, \beta) \sigma_k dz \equiv \tilde{C}(t); \quad (4.8)$$

- інтегральний оператор зворотної дії:

$$F_{+,n}^{-1}[\tilde{C}(t, \lambda)] = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \tilde{C}(t, \lambda) V_k(z, \lambda) \Omega_2(\lambda) d\lambda \equiv C_k(t) \quad k = 1, n; \quad (4.9)$$

- основна тотожність інтегрального перетворення Фур'є для диференціального оператора Лапласа:

$$F_{+,n} \left[ \sum_{k=1}^n \frac{\partial^2}{\partial z^2} C_k(t, z) \Theta(z - l_{k-1}) \Theta(l_k - z) \right] = -\lambda^2 \cdot \tilde{C}(t, \lambda) - \\ - \sigma_1 D_{z_1} [\alpha_{11}^0]^{-1} \cdot V_1(l_0, \lambda) \cdot C_{l_0}(t) - \sum_{k=1}^{n+1} \chi_k^2 \int_{l_{k-1}}^{l_k} C_k(t, z) V_k(z, \lambda) \sigma_k dz$$

У цих рівностях використовуються наступні позначення:

$V_k(z, \lambda)$  ( $k = \overline{1, n+1}$ ) – складові власної функції інтегрального перетворення Фур'є:

$$V_k(z, \lambda) = \prod_{k_1=1}^n \frac{\lambda}{\sqrt{D_{z_{k_1+1}}}} (\omega_{k-1,2}(\lambda) \cos \frac{\lambda}{\sqrt{D_{z_k}}} z - \omega_{k-1,1}(\lambda) \sin \frac{\lambda}{\sqrt{D_{z_k}}} z);$$

$$V_{n+1}(z, \lambda) = \omega_{n2}(\lambda) \cos \frac{\lambda}{\sqrt{D_{z_{n+1}}}} z - \omega_{n1} \sin \frac{\lambda}{\sqrt{D_{z_{n+1}}}} z;$$

$$\sigma_k = \prod_{j=k}^n \frac{1}{D_{z_k}}; \quad \sigma_{n+1} = \frac{1}{D_{z_{n+1}}};$$

$$\Omega_n(\lambda) = \sqrt{D_{z_{n+1}}} \left[ \omega_{n2}(\lambda)^2 + \omega_{n1}(\lambda)^2 \right]^{-1}; \quad k = \overline{1, n+1};$$

$$\omega_{01}(\beta) = -v_{11}^{01} \left( \frac{\lambda}{\sqrt{D_{z_0}}}, l_0 \right); \quad \omega_{02}(\beta) = -v_{11}^{02} \left( \frac{\lambda}{\sqrt{D_{z_0}}}, l_0 \right);$$

$$\omega_{jm}(\beta) = \omega_{j-1,2}(\beta) \Psi_{1m}^j \left( \frac{\lambda}{\sqrt{D_{z_i}}}, \frac{\lambda}{\sqrt{D_{z_{i+1}}}} \right) - \omega_{j-1,1}(\beta) \Psi_{2m}^j \left( \frac{\lambda}{\sqrt{D_{z_j}}}, \frac{\lambda}{\sqrt{D_{z_{i+1}}}} \right);$$

$$\Psi_{jm}^k \left( \frac{\lambda}{\sqrt{D_{z_k}}}, l_k, \frac{\lambda}{\sqrt{D_{z_{k+1}}}} \right) = v_{11}^{kj} \left( \frac{\lambda}{\sqrt{D_{z_k}}}, l_k \right) v_{22}^{km} \left( \frac{\lambda}{\sqrt{D_{z_{k+1}}}} \right) - v_{21}^{kj} \left( \frac{\lambda}{\sqrt{D_{z_k}}}, l_k \right) v_{12}^{km} \left( \frac{\lambda}{\sqrt{D_{z_{k+1}}}} \right);$$

$$v_{jm}^{k1} \left( \frac{\lambda}{\sqrt{D_{z_s}}}, l_k \right) = \frac{\lambda}{\sqrt{D_{z_s}}} \sin \frac{\lambda}{\sqrt{D_{z_s}}} l_k + \cos \frac{\lambda}{\sqrt{D_{z_s}}} l_k;$$

$$v_{jm}^{k2} \left( \frac{\lambda}{\sqrt{D_{z_s}}}, l_k \right) = \frac{\lambda}{\sqrt{D_{z_s}}} \cos \frac{\lambda}{\sqrt{D_{z_s}}} l_k + \sin \frac{\lambda}{\sqrt{D_{z_s}}} l_k;$$

$$s \in \{k, k+1\}; \quad j, m = 1, 2; \quad k = 1, n.$$

Як результат застосування інтегральних операторів (4.5) – 4.9) до задачі (4.1) – (4.4), одержимо таку задачу Коші:

$$\frac{d\tilde{C}_m(t, \eta_m, \lambda)}{dt} = -(\chi_1^2 + D_0 \eta_m^2 + \lambda^2) \tilde{C}_m(t, \eta_m, \lambda) - F_m(t, \eta_m) \quad (4.10)$$

$$\tilde{C}(t, \eta_m, \lambda)|_{t=0} = \tilde{C}_{0m}(\lambda),$$

Розв'язком задачі Коші, описаної рівняннями (4.33) є функції [75]:

$$\tilde{C}_m(t, \eta_m, \lambda) = e^{-(\chi_1^2 + D_0 \eta_m^2 + \lambda^2)t} \cdot \tilde{C}_{0m}(\eta_m, \lambda) + \int_0^t e^{-(\chi_1^2 + D_0 \eta_m^2 + \lambda^2)(t-\tau)} \cdot F_m(\tau) d\tau,$$

$$\text{де } F_m(t) = D_0 (-1)^m \eta_m \tilde{C}_1(t, \lambda) + \sigma_1 D_{z_1} \left[ \alpha_{11}^0 \right]^{-1} \cdot V_1(l_0, \lambda) \cdot C_{l_0m}(t).$$

Повертаючись до оригіналів, з використанням операторів зворотної дії отримаємо розв'язок:

$$\begin{aligned}
C_k(t, x, z) = & \int_0^t \int_0^R W_{l_0, k}(t - \tau; x, \zeta; z) \cdot C_{l_0}(\tau, \zeta) d\zeta d\tau + \\
& + \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_0^t \int_0^r \int_0^{l_{k_1}} H_{k, k_1}(t - \tau; x, \zeta; z, \xi) \cdot C_{0_{k_1}}(\zeta, \xi) \cdot \sigma_{k_1} d\zeta d\xi d\tau + \\
& + \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_0^t \int_0^{l_{k_1}} W_{R_{k, k_1}}(t - \tau; x; z, \xi) \cdot C_{l_{k_1}}(\tau, \xi) \sigma_{k_1} d\xi d\tau.
\end{aligned} \tag{4.11}$$

Якщо прийняти  $C_{l_0}, C_{l_{k_1}}, C_{0_{k_1}}$  як константи, то розв'язок набуде вигляду:

$$\begin{aligned}
C_k(t, x, z) = & C_{l_0} \int_0^t \int_0^R W_{l_0, k}(t - \tau; x, \zeta; z, l) d\zeta d\tau + \int_0^t \sum_{k_1=1}^{n+1} C_{R_{k_1}} \int_0^{l_{k_1}} W_{R_{k, k_1}}(t - \tau; x, R; z, \xi) \sigma_{k_1} d\xi d\tau + \\
& + \int_0^t \int_0^r \sum_{k_1=1}^{n+1} C_{0_{k_1}} \int_0^{l_{k_1}} H_{k, k_1}(t - \tau; x, \zeta; z, \xi) \sigma_{k_1} d\zeta d\xi d\tau,
\end{aligned} \tag{4.12}$$

Тут функції впливу визначені наступними виразами:

- функція впливу крайової умови для поверхні впливу  $z=l_0$  [75]:

$$W_{l_0, k}(t, x; z, \xi) = \frac{2}{R} \sum_{m=0}^{\infty} -\frac{D_{z_1} \cdot \sigma_1}{\alpha_{11}^0} \cdot \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} e^{-\lambda^2(t-\tau)} \cdot V_k(z, \lambda) V_1(l_0, \lambda) \Omega_n(\lambda) d\lambda (-1)^m \frac{\cos \eta_m \xi}{\eta_m},$$

- функція впливу крайової умови для поверхні впливу  $x=R$  [74]:

$$W_{R_{k, k_1}}(t; x, \zeta; z, \xi) = \frac{2}{R} \sum_{m=0}^{\infty} e^{-D_0 \eta_m^2 t} D_0 (-1)^{m+1} \eta_m \cdot \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} e^{-\lambda^2 t} \cdot$$

$$\cdot V_k(z, \lambda) \cdot V_{k_1}(\xi, \lambda) \Omega_n(\lambda) d\lambda (-1)^m \cdot \cos \eta_m x$$

- фундаментальна функція (функція Коші – функція впливу початкових умов) [74]

$$H_{k, k_1}(t; x, \zeta; z, \xi) = \frac{2}{R} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} e^{-\lambda^2 t} \cdot V_k(z, \lambda) \cdot V_{k_1}(\xi, \lambda) \Omega_n(\lambda) d\lambda \cdot \cos \eta_m \xi \cdot \cos \eta_m x.$$

Перейдемо від крайової задачі (4.1)-(4.4) до крайової стаціонарної задачі з

метою побудови в області  $I_{n_s} = \left\{ x \in (0, R), z : z \in \bigcup_{k=1}^{n+1} (l_{k-1}, l_k); l_0 \geq 0; l_{n+1} = \infty \right\}$

обмеженого розв'язку системи диференціальних рівнянь другого порядку:

$$D_0 \frac{\partial^2 C_k}{\partial x^2} + D_{z_k} \frac{\partial^2 C_k}{\partial z^2} = \gamma_k^2 \cdot C_k(x, z);$$

з початковими умовами по змінній  $z$ :

$$\left[ \alpha_{11}^0 \frac{d}{dz} + \beta_{11}^0 \right] C_1(x, z) \Big|_{z=l_0} = C_{l_0}(x); \quad \frac{\partial C_{n+1}}{\partial z} \Big|_{z=\infty} = 0$$

$$\left[ \frac{\partial}{\partial z} C_k - \xi_k \frac{\partial}{\partial z} C_{k+1} \right]_{z=l_k} = 0; \quad k = \overline{1, n}, \quad \text{де } \xi_k = \frac{D_k}{D_{k+1}}$$

з початковими умовами по змінній  $x$ :

$$\frac{\partial C_k}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0, \quad C_k \Big|_{x=R} = C_{l_k}(z).$$

Головним розв'язком цієї крайової задачі є:

- функція впливу крайової умови для поверхні впливу  $z=l_0$  [74]:

$$W_{l_0, k}(x, \zeta, z) = -\frac{D_{z_1} \sigma_1}{\alpha_{11}^0} \frac{2}{\pi} \int_0^\infty E(x, \zeta) \cdot V_k(z, \lambda) V_1(l_0, \lambda) \Omega_n(\lambda) d\lambda$$

- функція впливу крайової умови для поверхні впливу  $x=R$  [74]:

$$W_{R, k_1}(x, z, \xi) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{G_2(x)}{\Delta(\lambda)} \cdot V_k(z, \lambda) V_1(l_0, \lambda) \Omega_n(\lambda) d\lambda;$$

$$C_k(x, z) = \int_0^R W_{l_0, k}(x, \zeta; z) \cdot C_{l_0}(\zeta) d\zeta + \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_0^r \int_{l_{k_1-1}}^{l_{k_1}} H_{k, k_1}(x, \zeta; z, \xi) \cdot C_{0, k}(\zeta, \xi) \sigma_{k_1} d\zeta d\xi + \\ + \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_{l_{k_1-1}}^{l_{k_1}} W_{R, k_1}(x; z, \xi) \cdot C_{l_{k_1}}(\xi) \sigma_{k_1} d\xi.$$

$$\text{де } G_m(x) = \begin{cases} shq(R-x); & m=1 \\ q \cdot chqx; & m=2 \end{cases}; \quad \Delta(\lambda) = q \cdot chqR; \quad q = (\chi_1^2 + \lambda^2)^{1/2};$$

$$E(x, \zeta) = \frac{1}{q \cdot \Delta(\lambda)} \begin{cases} G_2(x) \cdot G_1(\zeta); & 0 < x < \zeta < R \\ G_2(\zeta) \cdot G_1(x); & 0 < \zeta < x < R \end{cases}$$

#### 4.1.2. Перевірка моделі на адекватність даним фізичного експерименту з використанням методів зворотніх задач

Фізичний експеримент проводився за допомогою томографічно-атомного зондування – ТАР (Tomographic Atom Probe). Базовий принцип застосування такого виду досліджень полягає в використанні іонізації і випарювання атомів з поверхні при допомозі електричного поля: імпульс високої напруги, що прикладається до наконечника, випаровує атоми з поверхні, які в подальшому збираються на детекторі, який здійснює аналіз досліджуваної області. Досліджуваний зразок виготовляється у формі гострого наконечника з радіусом заокруглення близько 20-50 нм з метою забезпечення дуже високого значення електричного поля на поверхні зразка при прикладанні напруги в декілька кіловольт. Поверхневі атоми контрольовано випарюються полем, шляхом періодично повторюваних (з частотою  $\sim 1$  КГц) імпульсів високої напруги на додаток до постійної напруги (рис. 4.2).

Час біжучого спектрометру дозволяє зробити хімічне ототожнення випаруваних атомів з поверхні наконечника. Протягом процесу дослідження, з наконечника шар за шаром випарюються атоми і іонами, які збираються на двосторонньому детекторі, що проводить аналіз досліджуваної області (15 нм x 15 нм).

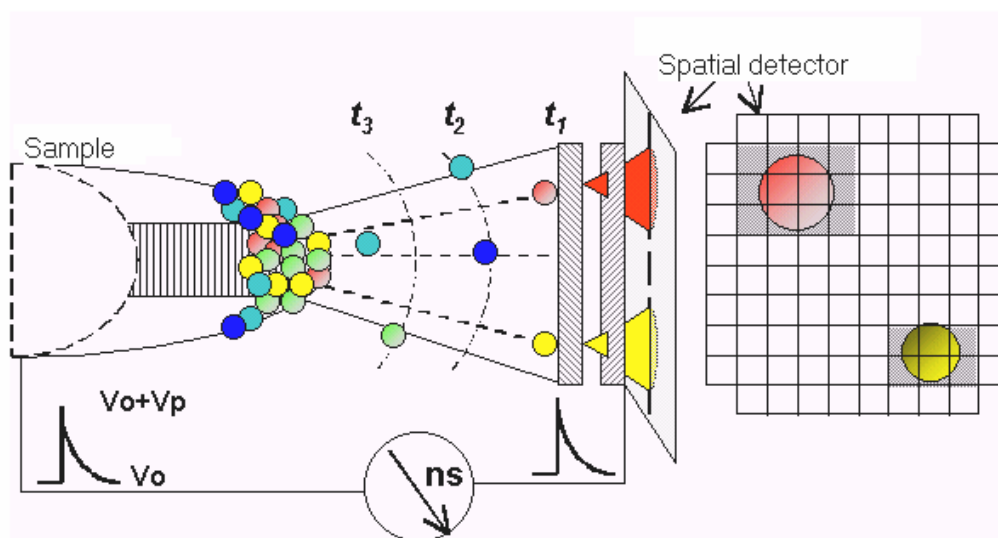


Рис. 4.2. Принцип дії томографічно-атомного зондування

Система ТАР, що розроблена в лабораторії Руанського університету [200], дозволяє проводити всебічне просторове дослідження поверхні зразка з точністю більше, ніж половина мілімікрона, при глибині близьке до 0.1 нм. Така висока роздільна здатність робить ТАР могутньою технікою для дослідження металевих шарів товщиною в декілька мілімікронів, як для матеріалів хімічної природи, так і особливостей атомної будови, як наприклад товщину шару або дифузії.

ТАР дослідження проводилися в умовах, близьких до вакууму ( $9 \cdot 10^{-10}$  mbar) і температура наконечника була близько 70К для запобігання проблем при випаровуванні атомів електричним полем. Немагнітний вольфрамовий наконечник використовувався як основа для ТАР-аналізу багат шарового середовища (Dy/Fe). Такі наконечники були виготовлені при допомозі двоступінчатого процесу. На першому етапі, вольфрамовий дріт товщиною 0.1 мм електрополяризувався при допомозі водяного розчину NaOH для того, щоб отримати наконечник з радіусом кривизни близько 10 нм. На наступному етапі, робилося зображення W наконечника при допомозі іонно-польового мікроскопа (Field Ion Microscopy) з використанням гелію, як газу для одержання зображень. Випарювання вольфрамового наконечника проводиться до тих пір, поки поверхня не стала чистою і півсферичною, і поки радіус кривизни не наблизиться до 40 нм.

Багат шаровість отримана при допомозі процесу випаровування чистих Fe і Dy елементів з W-наконечника. Зміщення зроблене під високим вакуумом з фоновим тиском  $8 \cdot 10^{-10}$  mbar і тиском під час процесу випаровування нижче ніж  $5 \cdot 10^{-8}$  mbar. Величина зміщення приблизно рівна 0.01 нм товщина контролювалася при допомозі кварцового монітора неподалік від основи. Температура основи – кімнатна.

В результаті серії ТАР-експериментів, що були проведені на (Fe/Dy) багат шарових середовищах для шарів різної товщини, одержаний аналіз багат шарового середовища (Fe 4 нм/Dy 3 нм) при кімнатній температурі. Наскільки відомо, диспрозій раніше не досліджувався при допомозі атомного



зондування, а тербій єдиний елемент RE, що вже випаровувався при допомозі електричного поля [186]. В тривимірній реконструкції досліджуваний простір такого багат шарового середовища представлений на рис. 4.18, який показує положення Dy, Fe, і W атомів. Кожна точка представляє атом.

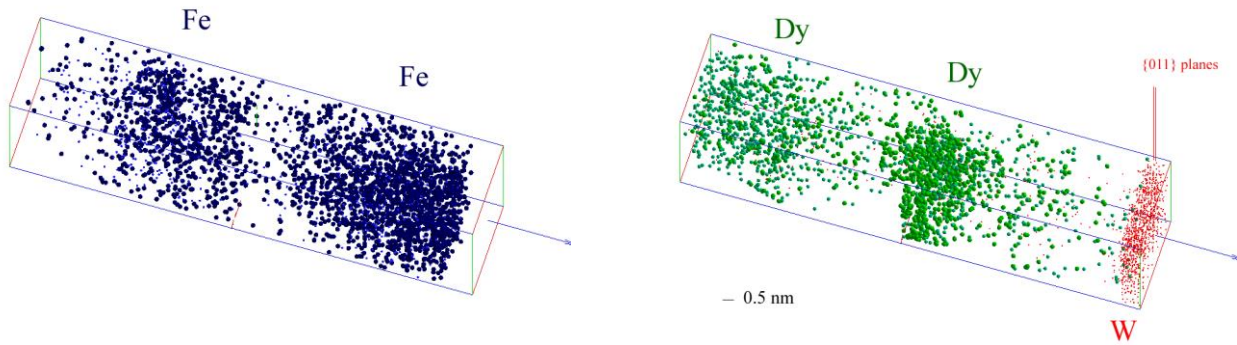


Рис. 4.3. 3D реконструкція (Dy 3nm/ Fe 4nm) багат шарового зміщення на W-основі. а) атоми Fe; б) атоми Dy і W.

В результаті експериментів були отримані експериментальні концентраційні профілі, які зображені на рис.4.4. [186] Тут можна спостерігати, що граничний простір між двома сусідніми шарами містить суміш атомів Fe і Dy, що вказує на важливість інтердифузії між шарами. Можна зробити оцінку, що ширина поверхні розділу близько  $1.7 \pm 0.4$  нм. Більше того, поверхні розділу для Fe/Dy and Dy/Fe виглядають симетричними, на відміну від попередніх результатів, одержаних при іншому dc-напиленні багат шаровості [186, 187]. Ймовірно, що такі результати одержані завдяки використанню теплової методики випаровування, яка значно менше енергетично затратна, ніж напилення.

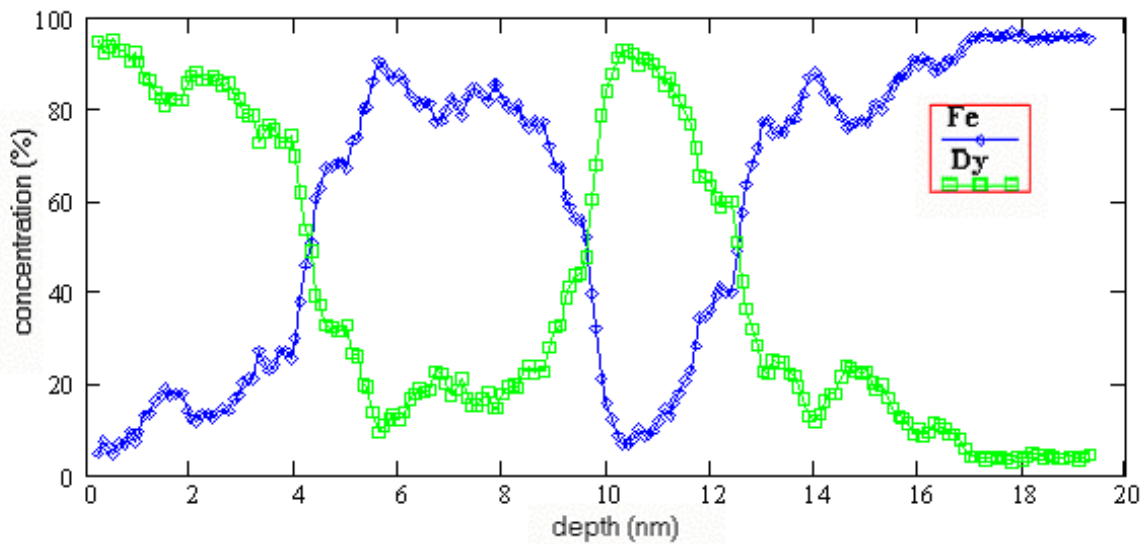


Рис.4.4. Експериментальні концентраційні профілі

Використовуючи отриманий аналітичний розв'язок моделі (4.12) і експериментальні профілі концентрації для Fe (Рис. 4.4.) Дейнекою В.С. та Петриком М.Р. була розв'язана зворотна задача по визначенню ефективних коефіцієнтів для Fe, як функції від глибини в шарі. Результати обчислень профілів ефективних коефіцієнтів дифузії подані на рис. 4.5

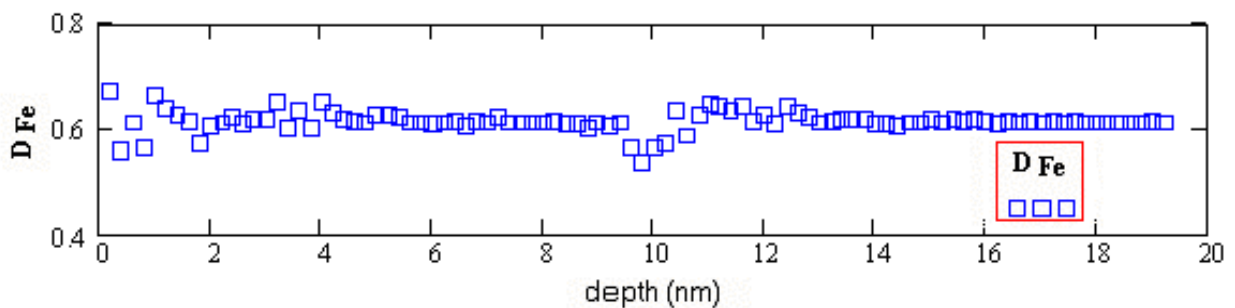


Рис. 4.5. Обчислений профіль коефіцієнтів дифузії для Fe

Як можна бачити з рис.4.5, коефіцієнти дифузії для Fe є повністю незалежними від глибини, і їх значення близьке до  $0.65 \text{ nm}^2/\text{s}$ .

### 4.1.3. Моделювання та аналіз модельних і експериментальних профілів концентрацій

Модельні концентраційні профілі одержані з профілю коефіцієнтів дифузії з використанням аналітичного розв'язку. Модельний профіль концентрації поданий на рис. 4.6. разом з експериментальним профілем концентрації.

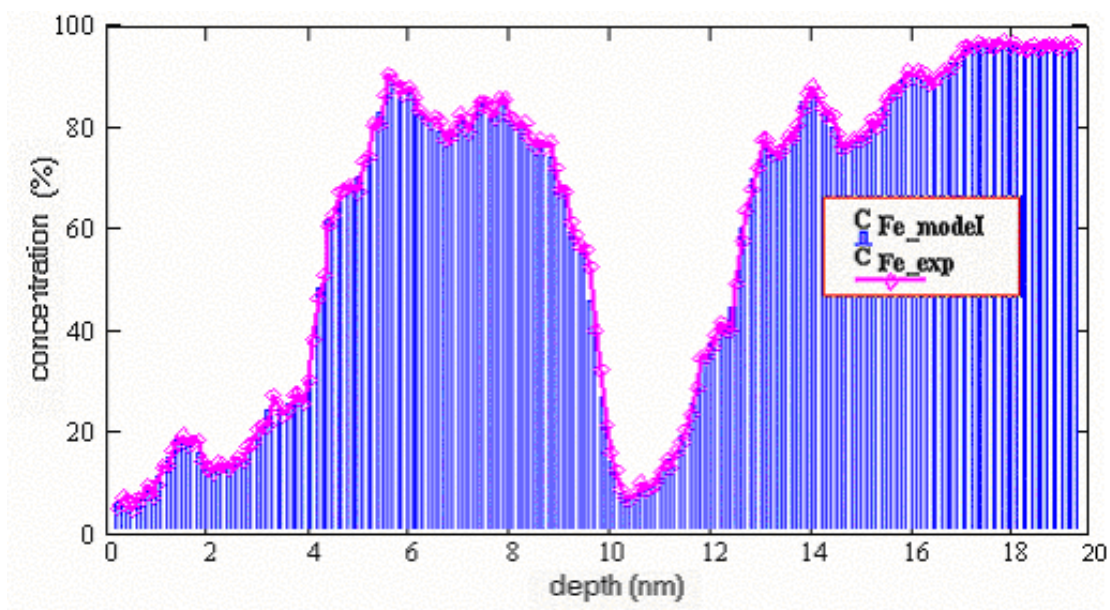


Рис. 4.6. Модельні і експериментальні концентрації Fe як функції глибини в шарі середовища

Як видно з рис. 4.6, профіль одержаний шляхом моделювання дуже добре узгоджується з відповідним експериментальним профілем. Максимальне відхилення не перевищує 2-3 %

Немає змоги говорити про якусь обґрунтованість розрахункового значення коефіцієнта дифузії Fe в Dy при кімнатній температурі, оскільки немає посилань на якісь експериментальні роботи по дослідженню рідкоземельних елементів.

Проте, приймаючи, що коефіцієнт дифузії для Fe зростає разом з масою матричного елементу (Dy), можна очікувати, що коефіцієнт дифузії для Fe в Dy повинен бути більший ніж для Au і менший ніж для U. Фактично, числові значення для експериментально отриманих коефіцієнтів дифузії Fe, взяті з

довідника, складають  $4 \cdot 10^{-36} \text{ м}^2 \cdot \text{с}^{-1}$  в Au і  $5 \cdot 10^{-17} \text{ м}^2 \cdot \text{с}^{-1}$  в U, при кімнатній температурі. Оскільки значення, одержане за даною моделлю для  $D_{\text{Dy}}$  матриці близькі до  $6 \cdot 10^{-19} \text{ м}^2 \cdot \text{с}^{-1}$ , то ми можемо стверджувати, що дана модель дає прийнятний опис хімічного змішування на границях розділу.

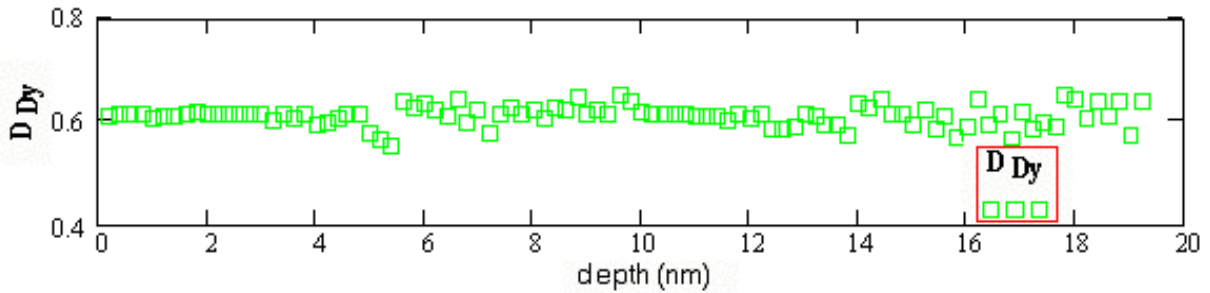


Рис.4.7 – Обрахований профіль коефіцієнтів дифузії для Dy

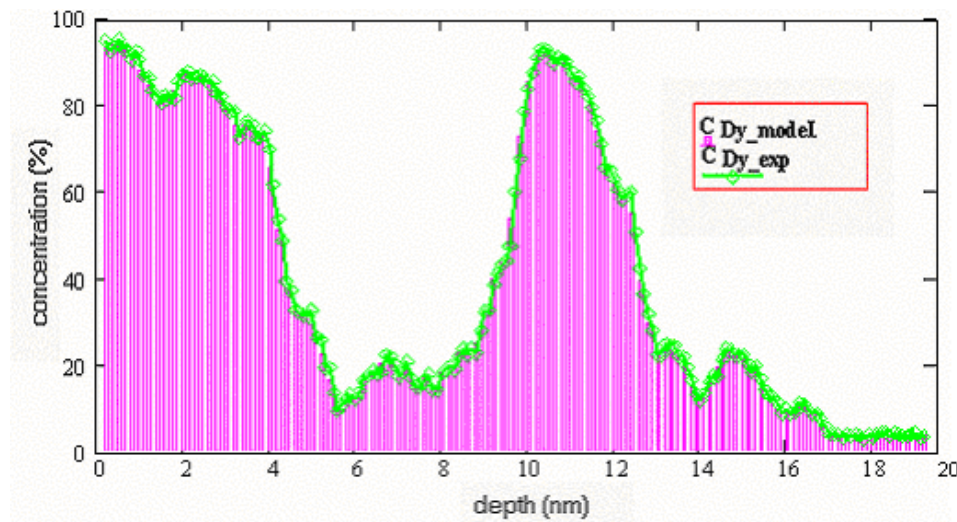


Рис. 4.8. Модельний і експериментальний профілі концентрації для Dy як функції від глибини шару середовища

В такому випадку (використовуючи рівняння (4.12) і експериментальний концентраційний профіль) був визначений ефективний коефіцієнт дифузії для Dy. На рис. 4.7. наведено профіль значень ефективних коефіцієнтів дифузії для Dy в залежності від глибини шару. Як видно з рисунку, значення коефіцієнту дифузії Dy є майже постійним на усій глибині зразка, і його значення близьке до  $0.6 \text{ нм}^2/\text{с}$ .

Обчислений профіль концентрації для Dy, одержаний на основі профілю коефіцієнтів дифузії, представлений на рис. 4.8. разом з експериментальним профілем. Знову ж таки, експериментальні і модельні профілі досить добре

узгоджуються між собою, що дає змогу говорити про достовірність математичної моделі.

Важливо відмітити, що значення одержані для обох коефіцієнтів дифузії є практично однаковими, що є результатом поверхневої симетрії. Отож, можна вважати, що профілі коефіцієнтів дифузії для Fe і Dy одержані з даної математичної моделі є чисельно коректними. З рис 4.6, 4.8 видно що на глибині до 4 нм і від 10 до 12 нм спостерігається мінімальна концентрація заліза (до 20 %) та максимальна концентрація диспрозію (80-95 %), а на глибині 14-20 нм – заліза 65-85 %, диспрозію 15-35 %, тобто встановлено суттєву відмінність концентрацій заліза і диспрозію на різній глибині середовища за рахунок різної інтенсивності їх дифузії в шарах.

Отриманий розв'язок математичної моделі дозволяє також будувати концентраційні розподіли для дифундованих компонент для різного часу формування наноплівки.

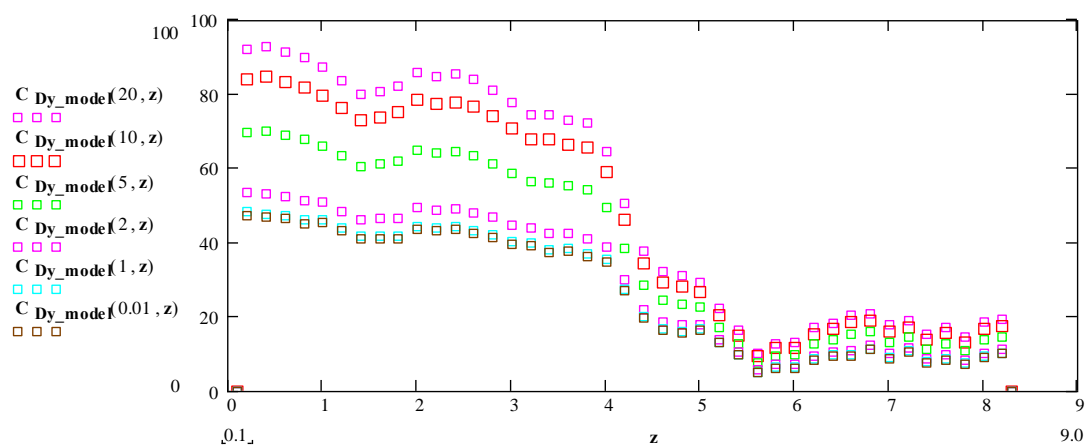


Рис. 4.9. Динаміка залежності концентраційних розподілів вздовж координати товщини мультишару та приведенного часу

Рис. 4.9. відображає динаміку зміни концентрацій від приведенного часу (реальний час помножений на коефіцієнт дифузії  $\tau = D_{Dy}t$ ). Як видно з рис.9, при  $\tau = 20$  уже практично спостерігаємо збіжність до крайової умови, де заданий експериментальний концентраційний розподіл. При наближенні до нуля спостерігаємо повільне зменшення концентраційного розподілу.

## 4.2. Математичне моделювання концентраційних розподілів Fe/Tb - магнітних багатоскладових середовищ

### 4.2.1. Фізико-математичний опис проблеми та алгоритмізація аналітичного розв'язку

Дослідження процесів дифузійного переносу в неоднорідних середовищах на сьогоднішній день вимагає розвитку нових якісних методів моделювання, що дозволяють описувати складні механізми системи інтерфейсних взаємодій між усіма складовими переносу та нестационарних режимів переносу на масообмінних поверхнях.

В [76, 155, 166] розглянуті задачі переносу для неоднорідних середовищ з урахуванням системи механізмів інтерфейсних взаємодій та нестационарних режимів переносу на масообмінних поверхнях. В ряді досліджень дифузійного переносу отримані концентраційні залежності, що мають складний неоднорідний характер (рис. 4.10) і для побудови математичного опису концентраційних розподілів та параметрів внутрішньої кінетики (коефіцієнтів дифузії) потребують використання спеціалізованого комплексу диференціальних гібридних операторів.

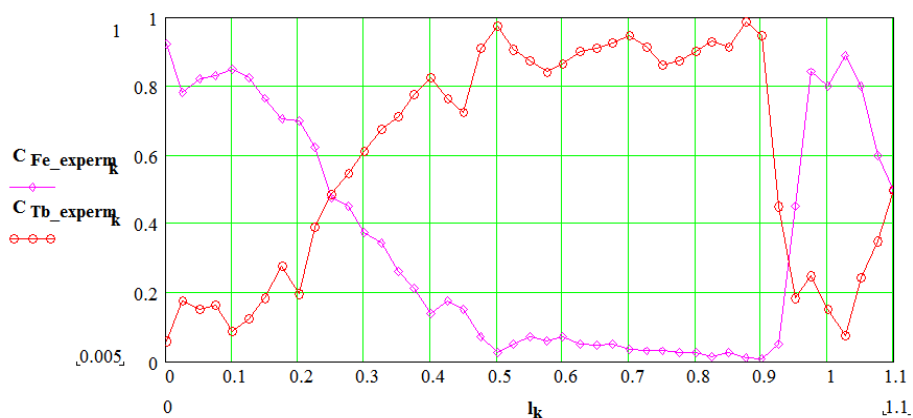


Рис. 4.10. Профілі Fe – Tb концентрацій в багатоскладовому дифузійному середовищі вздовж товщини зразка (Дані Лабораторії фізики матеріалів Руанського Університету, (Франція))

Постановка задачі. Розглянемо процес переносу в обмеженому неоднорідному n- інтерфейсному циліндричному середовищі з різними фізико-хімічними характеристиками і дифузійними властивостями на кожному шарі.

Математична модель такого процесу описується у вигляді крайової задачі про побудову обмеженого в області

$$D_n^+ = \left\{ (t, r, x) : t > 0, r \in \bigcup_{m=1}^{n+1} (R_{m-1}, R_m); R_0 = 0; R_{n+1} = \infty, x \in (0, h) \right\}$$

розв'язку системи рівнянь переносу для обмеженого циліндричного  $n$ -складового неоднорідного (по координаті  $r$ ) середовища

$$\frac{\partial u_m(t, r, x)}{\partial t} = D_m \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) u_m(t, r, x) + D_L \frac{\partial^2 u_m}{\partial x^2} \quad (4.13)$$

за початкових умов:

$$u_m(t, r, x) \Big|_{t=0} = g_m, r \in (R_{m-1}, R_m); m = \overline{1, n+1}, R_0 = 0, \quad (4.14)$$

крайових умов по радіальній змінній  $r$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial r} u_1(t, r, x) &= 0, \\ u_{n+1}(t, r, x) \Big|_{r=R_{n+1}} &= q_R \end{aligned}, \quad (4.15)$$

умов спряження

$$\begin{aligned} (u_k(t, r) - u_{k+1}(t, r)) \Big|_{r=R_k} &= 0(t); \\ \frac{\partial}{\partial r} (U_k - \eta_k U_{k+1}) \Big|_{r=R_k} &= 0, \quad \eta_k = \frac{D_{k+1}}{D_k}, \quad k = \overline{1, n}. \end{aligned} \quad (4.16)$$

та крайових умов по змінній  $x$

$$\frac{\partial u_m(t, r, x)}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0, \quad u_m(t, r, x) \Big|_{x=L} = u_{L_m}. \quad (4.17)$$

До описаної задачі застосуємо послідовно інтегральні перетворення:

а) інтегральне перетворення  $\cos$ -Фур'є на сегменті  $(0, L)$  по змінній  $x$ , визначене формулами (2.23) – (2.24) [74, 97];

б) по змінній  $r$  інтегральне перетворення Ганкеля 1-го роду для  $n$ -складового обмеженого середовища, визначене формулами [74, 97]:

- інтегральний оператор прямої дії

$$B_n[u(r)] = \int_0^R u(t, r, x) V_0(r, \lambda_j) \sigma(r) dr = \sum_{m=1}^{n+1} \int_{R_{m-1}}^{R_m} u_m(t, r, x) V_{0_m}(r, \lambda_j) \sigma_m r dr \equiv q_j(t, \lambda_j, x), \quad (4.18)$$

КОМПОНЕНТИ ЯКОГО МАЮТЬ ВИГЛЯД

$$B_{0,n}[\dots] = \left[ \int_0^{R_1} \dots V_{0_1}(r, \lambda_j) \sigma_1 r dr \int_{R_1}^{R_2} \dots V_{0_2}(r, \lambda_j) \sigma_2 r dr \dots \right. \\ \left. \dots \int_{R_{n-1}}^{R_n} \dots V_{0_n}(r, \lambda_j) \sigma_n r dr \int_{R_n}^{R_{n+1}} \dots V_{0_{n+1}}(r, \lambda_j) \sigma_{n+1} r dr \right],$$

- інтегральний оператор зворотної дії

$$B_n^{-1}[u_j(t, \lambda_j, z)] = \sum_{j=1}^{\infty} u_j(t, \lambda_j, x) \frac{V_0(r, \lambda_j)}{\|V_0(r, \lambda_j)\|^2}, \quad (4.19)$$

КОМПОНЕНТИ ЯКОГО МАЮТЬ ВИГЛЯД

$$B_n^{-1}[\dots] = \begin{bmatrix} \sum_{j=1}^{\infty} \dots \frac{V_{0_1}(r, \lambda_j)}{\|V_{0_1}(r, \lambda_j)\|^2} \\ \sum_{j=1}^{\infty} \dots \frac{V_{0_2}(r, \lambda_j)}{\|V_{0_2}(r, \lambda_j)\|^2} \\ \dots \dots \dots \\ \sum_{j=1}^{\infty} \dots \frac{V_{0_{n+1}}(r, \lambda_j)}{\|V_{0_{n+1}}(r, \lambda_j)\|^2} \end{bmatrix}.$$

та основну тотожність інтегрального перетворення диференціального оператора Бесселя  $B_0$ :

$$B_n^{-1} \left[ \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) [u_m(t, r, x)] \right] = -\lambda_j^2 \cdot u_j(t, \lambda_j, x) + R \cdot V_{0_{n+1}}(R_{n+1}, \lambda_j) \cdot q_R(t, x).$$

Тут компоненти власної вектор-функції  $V_0(r, \lambda_j)$ , що відповідають власним числам  $\lambda_j$ ,  $j = \overline{0, \infty}$ :

$$V_{0_1}(r, \lambda_j) = \Delta_0^n(\lambda_j) J_{0_1}(\lambda_j r),$$



$$V_{0_m}(r, \lambda_j) = \left( \prod_{m_1=m}^n \Delta_{0_{m_1+1}}(\lambda_j) \right) [\omega_{m-1,2}(\lambda_j) J_{0_k}(b_{kj}r) - \omega_{m-1,1}(\lambda_j) N_{0_k}(b_{kj}r)], k = \overline{2, n},$$

$$V_{0_{n+1}}(r, \lambda_j) = \omega_{n+1,2}(\lambda_j) J_{0_{n+1}}(b_{n+1j}r) - \omega_{n+1,1}(\lambda_j) N_{0_{n+1}}(b_{n+1j}r),$$

$$b_{mj}(\lambda_j) = \frac{\beta_j}{D_{R_m}}, m = \overline{1, n+1}.$$

$\{\lambda_j\}_1^\infty$  – спектр власних чисел інтегрального перетворення, що є коренями

трансцендентного рівняння

$$\delta_0^n(\lambda) \equiv v_{22}^{n+1,1}(b_{n+1}R_{n+1})\omega_{n,2}(\lambda) - v_{22}^{n+1,2}(b_{n+1}R_{n+1})\omega_{n,1}(\lambda) = 0,$$

$$\text{Тут } \Delta_{0_n}(\lambda_j) = \prod_{i=1}^n \Delta_{0_{i+1}}(\lambda_j) = \prod_{i=1}^n \frac{2}{\pi R_i b_{i+1j}},$$

$$\omega_{mi}(\lambda_j) = \omega_{m-1,2}(\lambda_j) \psi_{1i}^m(b_{mj}R_m, b_{m+1j}R_m) - \omega_{m-1,1}(\lambda_j) \psi_{2i}^m(b_{mj}R_m, b_{m+1j}R_m);$$

$$\omega_{1i}(\lambda_j) = \psi_{1i}^1(b_{1j}R_1, b_{2j}R_2), i = \overline{1, 2};$$

$$\omega_{2i}(\lambda_j) = \omega_{22}(\beta) \psi_{1i}^2(b_{2j}R_2, b_{3j}R_2) - \omega_{21}(\lambda) \psi_{2i}^2(b_{2j}R_2, b_{3j}R_2);$$

$$\psi_{ji}^m(b_m R_m, b_{m+1j} R_m) = v_{11}^{mj}(b_{mj} R_m) v_{22}^{mi}(b_{m+1j} R_m) - v_{21}^{mj}(b_{mj} R_m) v_{12}^{mi}(b_{m+1j} R_m);$$

$$v_{ip}^{m1}(b_{sj} R_m) \equiv \left( \alpha_{ip}^m \frac{d}{dr} + \beta_{ip}^m \right) J_0(b_{sj} r) \Big|_{r=R_m},$$

$$v_{ip}^{m2}(b_{sj} R_m) \equiv \left( \alpha_{ip}^m \frac{d}{dr} + \beta_{ij}^m \right) N_0(b_{sj} r) \Big|_{r=R_m}, i, p = \overline{1, 2}, s \in \{m, m+1\},$$

$$\text{де } \alpha_{11}^m = 0, \alpha_{12}^m = 0, \beta_{11}^m = 1, \beta_{12}^m = 1, \alpha_{21}^m = 1, \alpha_{22}^m = \eta, \beta_{11}^m = 0, \beta_{12}^m = 0$$

Компоненти вагової функції мають вигляд

$$\sigma_m = \frac{1}{D_{R_m}} \prod_{i=m}^n \frac{R_{i+1}}{R_i}, k = \overline{1, n-1}; \sigma_n = \frac{1}{D_{R_n}}; \sigma_{n+1} = \frac{1}{D_{R_{n+1}}}.$$

Квадрат норми власної функції визначається формулою

$$\|V_0(r, \lambda_j)\|^2 \equiv \sum_{m=1}^{n+1} \int_{R_{m-1}}^{R_m} [V_{0_m}(r, \lambda_j)]^2 \sigma_m r dr$$

В результаті застосування (2.23), (4.18) до задачі (4.13) – (4.17) одержуємо задачу Коші:

$$\frac{d}{dt}u_{ij}(t, \lambda_j) = -\left(D_L\left(\frac{\pi i}{R}\right)^2 + \lambda_j^2\right)u_{ij}(t, \lambda_j) = F_{ij}(t), \quad (4.20)$$

$$u_{ij}(t)|_{t=0} = g_{ij}$$

Розв'язком задачі Коші (4.20) є функція [74, 112]

$$u_{ij}(t, \lambda_j) = e^{-\left(D_L\left(\frac{\pi i}{h}\right)^2 + \lambda_j^2\right)t} g_{ij} + \int_0^t e^{-\left(D_L\left(\frac{\pi i}{h}\right)^2 + \lambda_j^2\right)(t-\tau)} F_{ij}(\tau) d\tau,$$

$$\text{де } F_{ij}(t) = q_{R_j}(t) + u_{L_i}(t), \quad g_{ij} = \sum_{m=1}^{n+1} \int_{R_{m-1}}^{R_m} g_m(r) V_{0_m}(r, \lambda_j) \sigma_m r dr.$$

Повертаючись до оригіналів, з послідовним застосуванням інтегральних операторів зворотної дії, визначеними формулами (2.24), (4.19), отримаємо наступний розв'язок задачі (4.13) – (4.17) [74,5].

$$\begin{aligned} u_m(t, r, x) = & \int_0^L \sum_{m_1=0}^{n+1} \int_{R_{m_1-1}}^{R_{m_1}} H_{m, m_1}(t; r, \rho; x, \zeta) g_{m_1}(\rho, \zeta) \sigma_{m_1} \rho d\rho d\zeta + \\ & + \int_0^t \sum_{m_1=1}^{n+1} \int_{R_{m_1-1}}^{R_{m_1}} W_{L, m_1}(t-\tau; r, \rho; x, L) u_{L, m_1}(\tau, \rho) \sigma_{m_1} \rho d\rho d\tau + \\ & + \int_0^t \int_0^L W_{R, m}(t-\tau; r, R; x, \zeta) q_R(\tau, \xi) d\zeta d\tau, \quad m = \overline{1, n+1} \end{aligned} \quad (4.21)$$

У цій формулі визначені функції впливу, що описуються наступними виразами:

- функції впливу крайової умови по радіальній координаті r (при r=R):

$$W_{R, m}(t; r, R; x, \zeta L) = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\varepsilon_i R}{L} e^{-\left(D_L\left(\frac{i\pi}{R}\right)^2 + \lambda_j^2\right)t} \frac{V_{0_{m_1}}(R, \lambda_j) V_{0_m}(r, \lambda_j)}{\|V_0(r, \lambda_j)\|^2} \cos\left(\frac{i\pi}{L}x\right) \cos\left(\frac{i\pi}{L}x\right)$$

- функції впливу крайової умови по координаті x (при x=L):

$$W_{h_{m,n+1}}(t; r, \rho; x, L) = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \varepsilon_i \frac{i\pi}{L^2} (-1)^{i+1} e^{-\left(D_L \left(\frac{i\pi}{R}\right)^2 + \lambda_j^2\right)t} \frac{V_{0_{m_1}}(\rho, \lambda_j) V_{0_m}(r, \lambda_j)}{\|V_0(r, \lambda_j)\|^2} \cos\left(\frac{i\pi}{L} x\right)$$

- функція впливу початкових умов:

$$H_{h_{m,m_1}}(t; r, \rho; x, \zeta) = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\varepsilon_i}{L} e^{-\left(D_L \left(\frac{i\pi}{L}\right)^2 + \lambda_j^2\right)t} V_{0_{m_1}}(\rho, \lambda_j) V_{0_m}(r, \lambda_j) \cos\left(\frac{\pi i}{L} \zeta\right) \cos\left(\frac{\pi i}{L} x\right)$$

$m, m_1 = \overline{1, n+1}$

#### 4.2.2. Моделювання та аналіз модельних та експериментальних профілів концентрацій

На рисунках 4.2 та 4.3. подані профілі розподілів коефіцієнтів дифузії для Fe та Tb, відповідно, в багатошаровому Fe/Tb – середовищі як результат розв’язання зворотної задачі (виконаного Дейнекою В.С. та Петриком М.Р.) на основі аналітичного розв’язку математичної моделі (див. п.4.1.1.) та експериментальних даних.

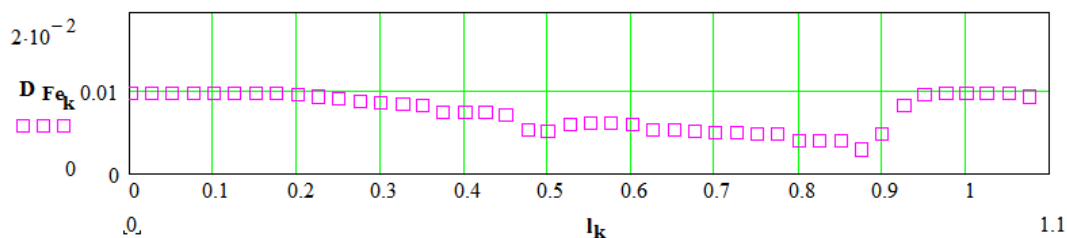


Рис. 4.11. Профіль коефіцієнту дифузії Fe, [nm<sup>2</sup>/s]

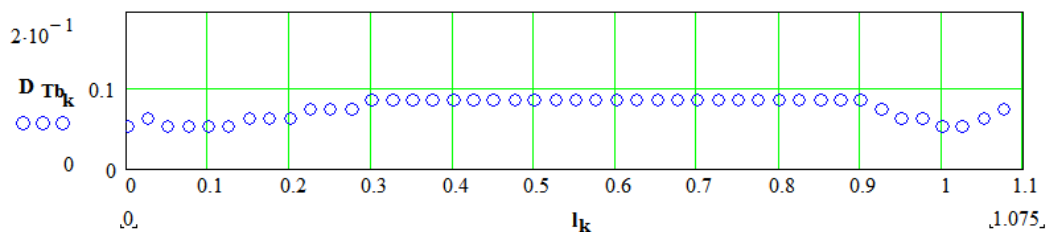


Рис. 4.12. Профіль коефіцієнту дифузії для Tb, [nm<sup>2</sup>/s]

З використанням спеціально розробленого Java-програмного забезпечення була реалізована математична модель, опис якої поданий в

п. 4.2.1. Отримано графічний розв'язок прямої задачі дифузійного переносу в багат шаровому Fe/Tb-середовищі.

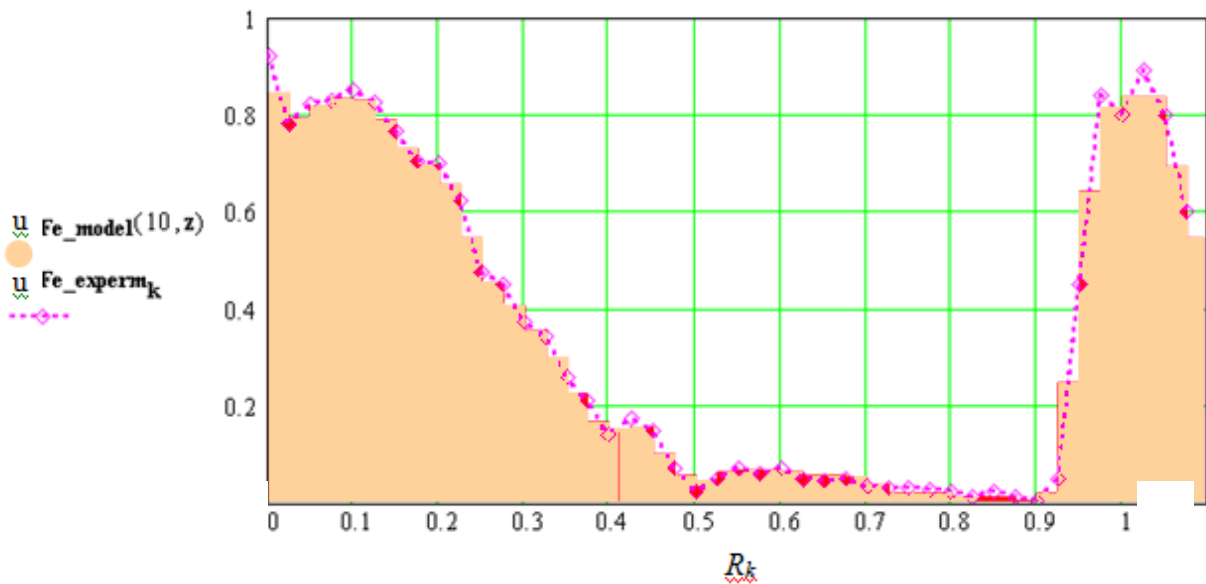


Рис. 4.13. Модельний та експериментальний профілі концентрацій для Fe (швидкість наплення 0.00237 nm/s)

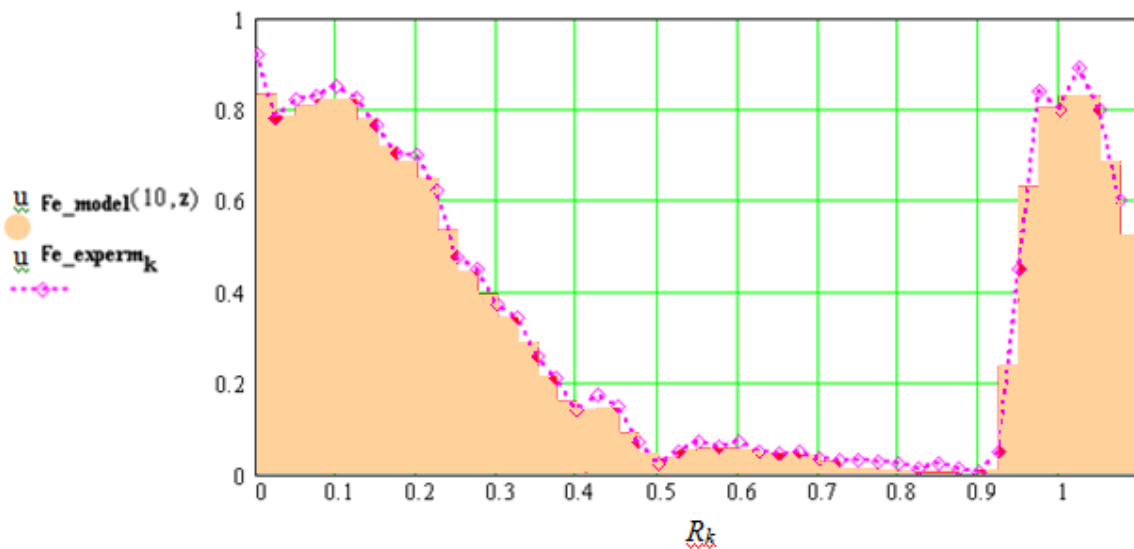


Рисунок 4.14. Модельний та експериментальний профілі концентрацій для Fe (швидкість наплення 0.00137 nm/s)

Проведемо аналіз концентраційних полів (по компоненті Fe). На рис. 4.13 – 4.18 подано порівняльну картину модельних і експериментальних профілів розподілів концентрації для Fe для різних швидкостей наплення [nm/s]. Як видно з наведених рисунків, модельні профілі досить

добре узгоджуються з експериментальними даними. При швидкості напilenня 0.00237 nm/s (рис. 4.13) та 0.0039 nm/s (рис. 4.15) спостерігаємо практично повне співпадання модельного та експериментально профілів концентрації.

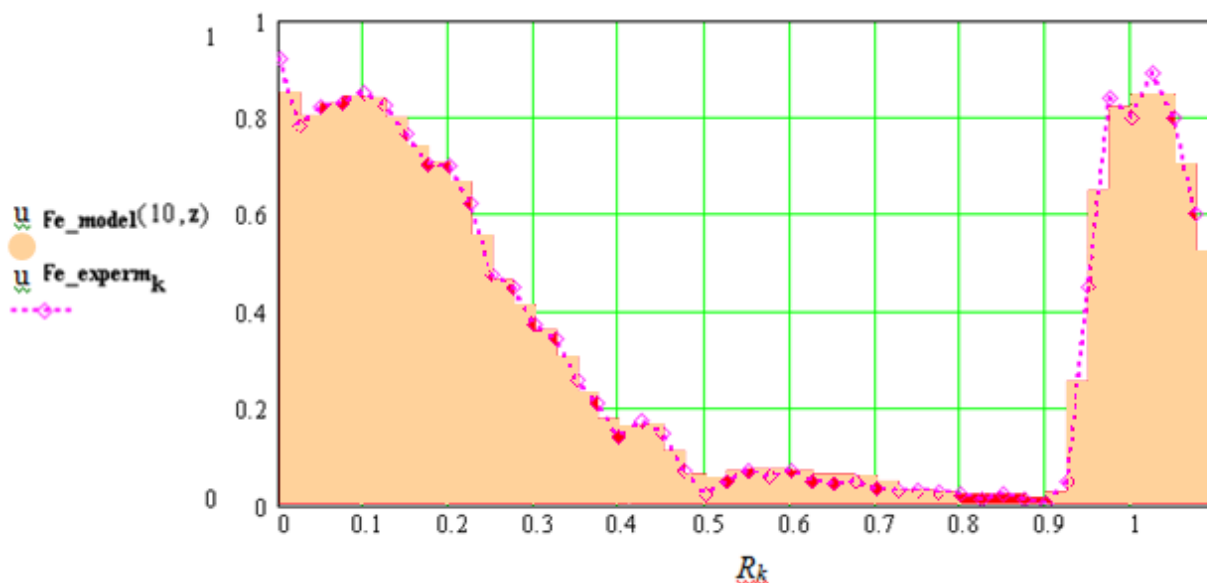


Рисунок 4.15. Модельний та експериментальний профілі концентрацій для Fe (швидкість напilenня 0.0039 nm/s)

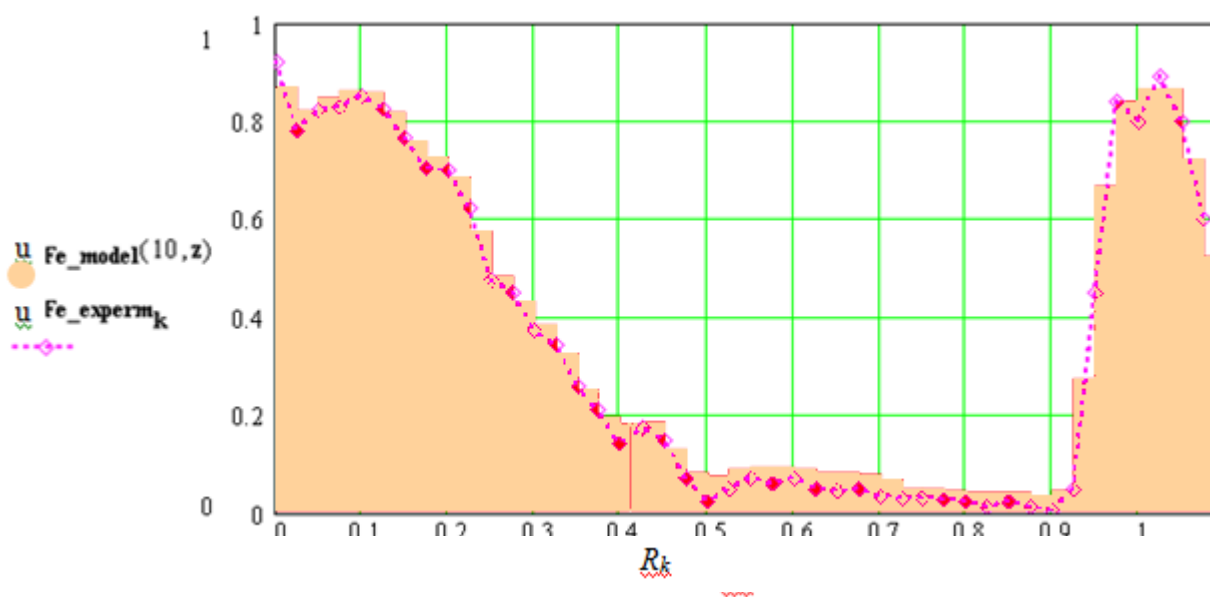


Рисунок 4.16. Модельний та експериментальний профілі концентрацій для Fe (швидкість напilenня 0.00537 nm/s)

Для швидкостей 0.00137 nm/s (рис. 4.5) та 0.0539 nm/s (рис. 4.16) спостерігаємо досить добре узгодження, відхилення модельного профілю від експериментального не перевищує 2%. Для швидкостей 0.00837 nm/s

(рис. 4.17) та 0.0137 nm/s (рис. 4.18.) видно деякі відхилення модельного профілю від експериментального, проте похибка знаходиться в межах 5-10 %.

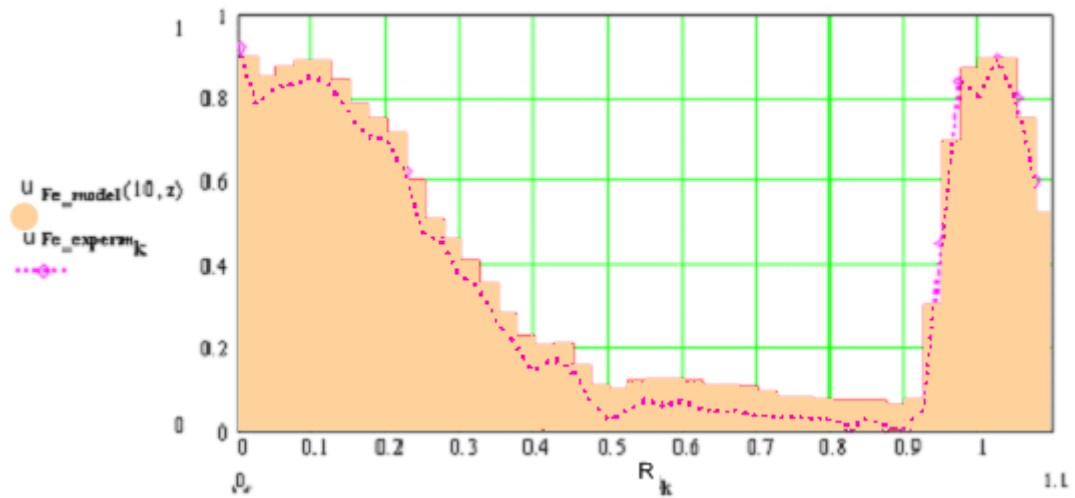


Рисунок 4.17. Модельний та експериментальний профілі концентрацій для Fe (швидкість наповнення 0.00837 nm/s)

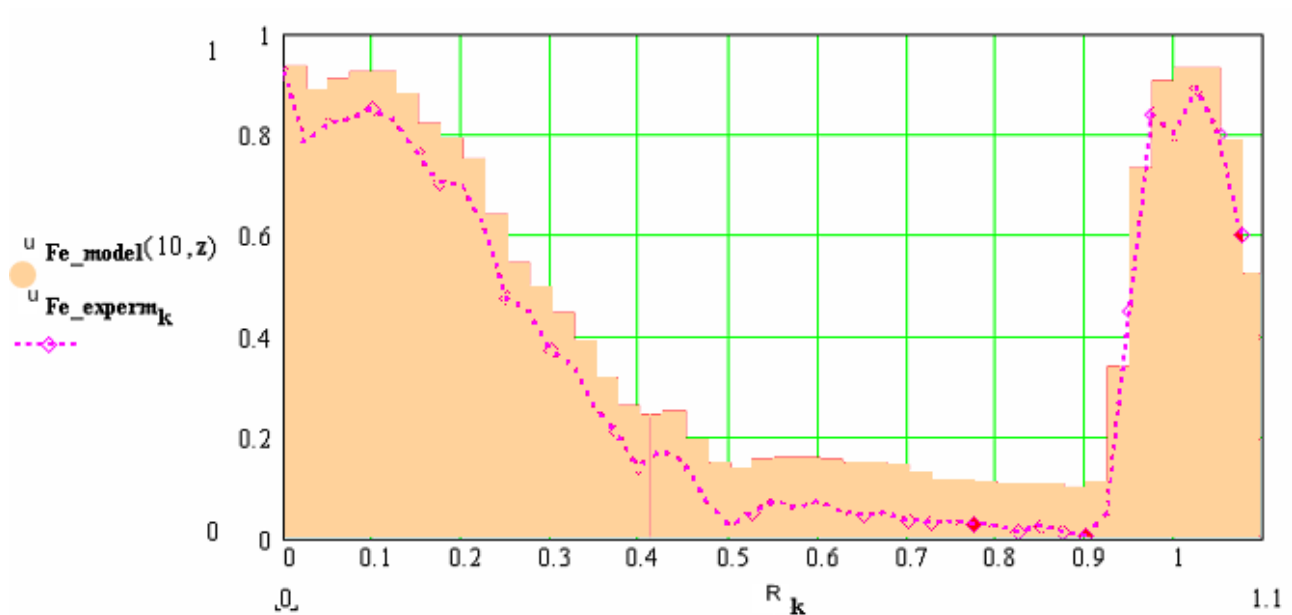


Рисунок 4.18. Модельний та експериментальний профілі концентрацій для Fe (швидкість наповнення 0.0137 nm/s)

За допомогою комп'ютерного моделювання отримано графічний розв'язок прямої задачі дифузійного переносу в багат шаровому Fe/Tb-середовищі щодо концентраційних полів (по компоненті Fe). Зокрема на

наступних рисунках подано модельні і експериментальні профілі розподілів концентрації Tb для різних швидкостей наплення [nm/s].

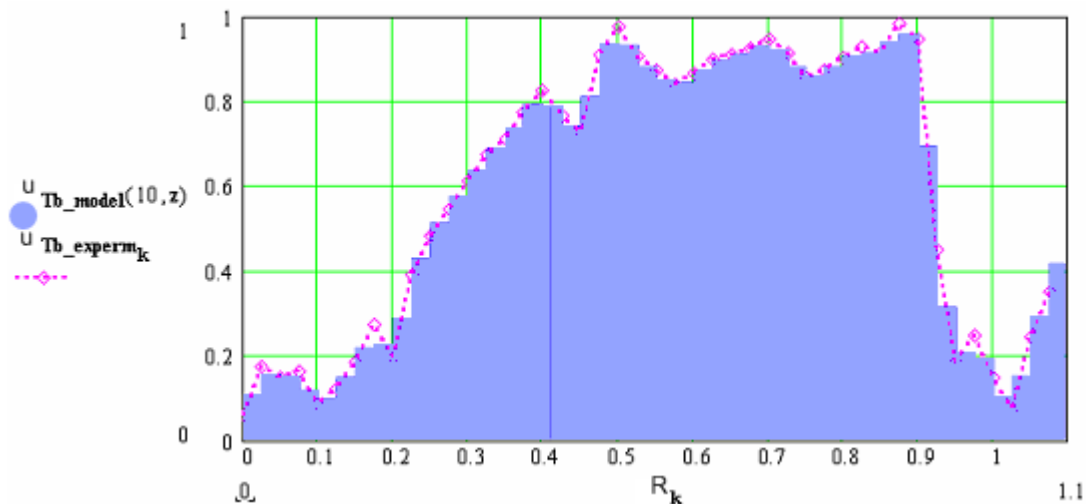


Рисунок 4.19. Модельний та експериментальний профілі концентрацій для Tb (швидкість наплення 0.00237 nm/s)

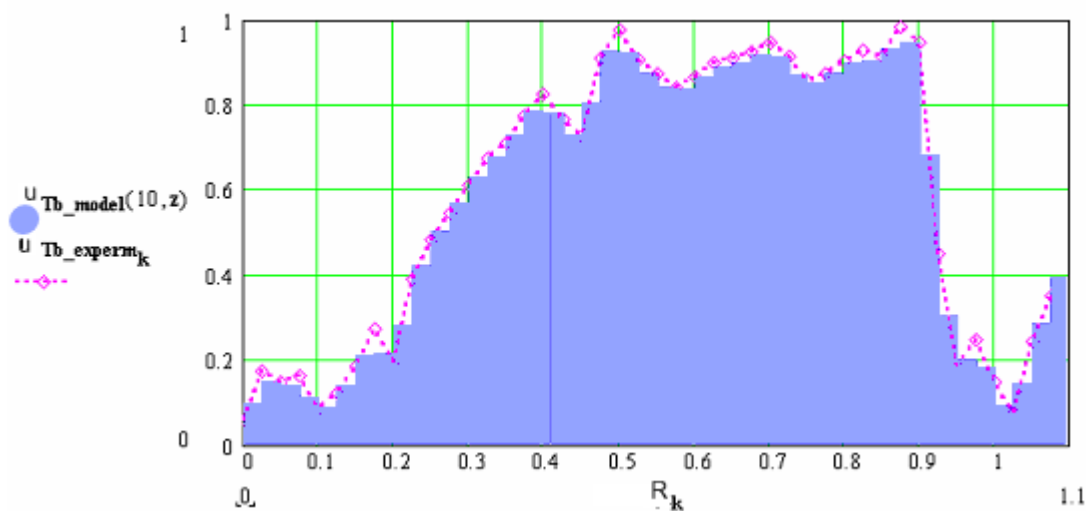


Рисунок 4.20. Модельний та експериментальний профілі концентрацій для Tb (швидкість наплення 0.00137 nm/s)

Як видно з рисунків 4.19 – 4.24, модельні профілі досить добре узгоджуються з експериментальними даними. При швидкості наплення 0.00237 nm/s (рис. 4.19) та 0.0039 nm/s (рис. 4.21) спостерігаємо практично повне співпадання модельного та експериментально профілів концентрації

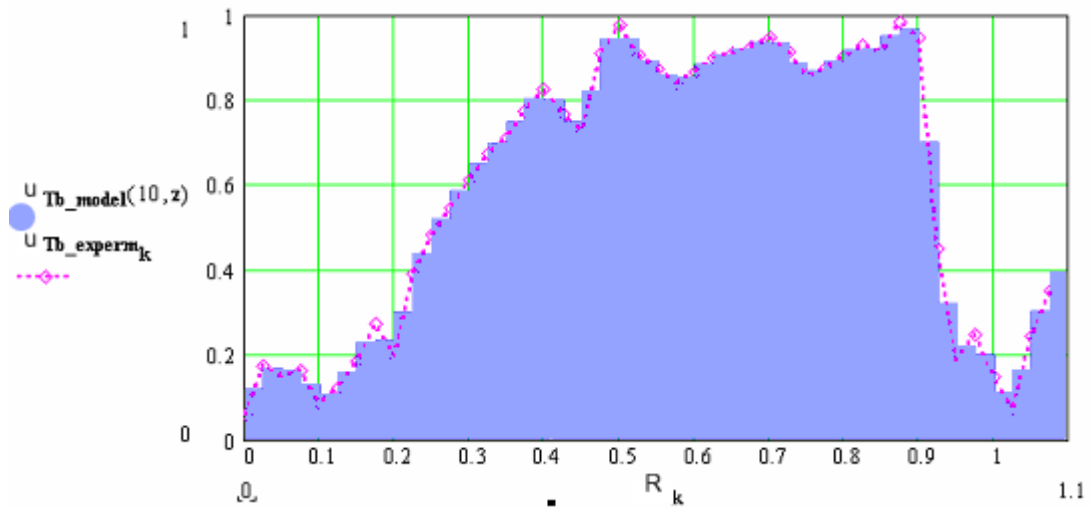


Рисунок 4.21. Модельний та експериментальний профілі концентрацій для Tb (швидкість наплення 0.00337 nm/s)

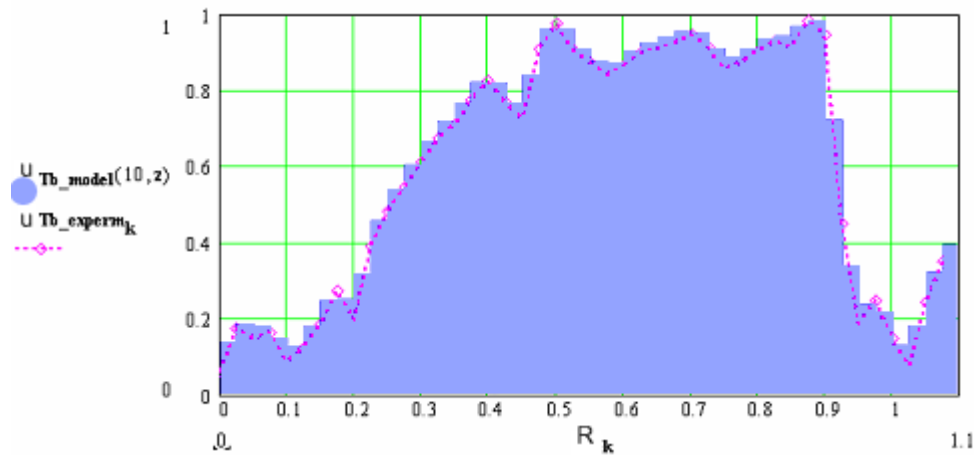


Рисунок 4.22. Модельний та експериментальний профілі концентрацій для Tb (швидкість наплення 0.00537 nm/s )

Для швидкостей 0.00137 nm/s (рис. 4.20) та 0.0539 nm/s (рис. 4.22) спостерігаємо досить добре узгодження, відхилення модельного профілю від експериментального не перевищує 2 %.



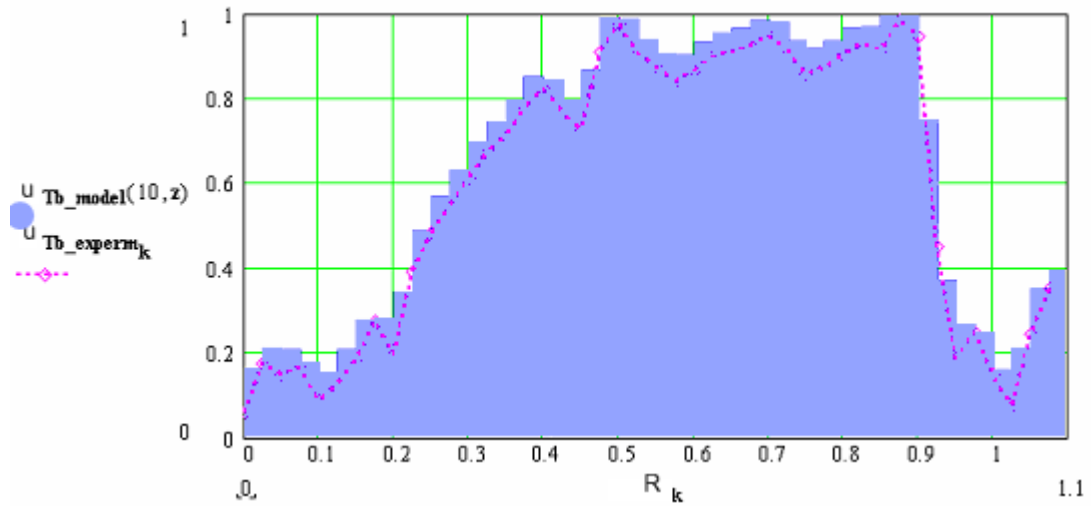


Рисунок 4.23. Модельний та експериментальний профілі концентрацій для ТЬ (швидкість наплення 0.00837 nm/s)

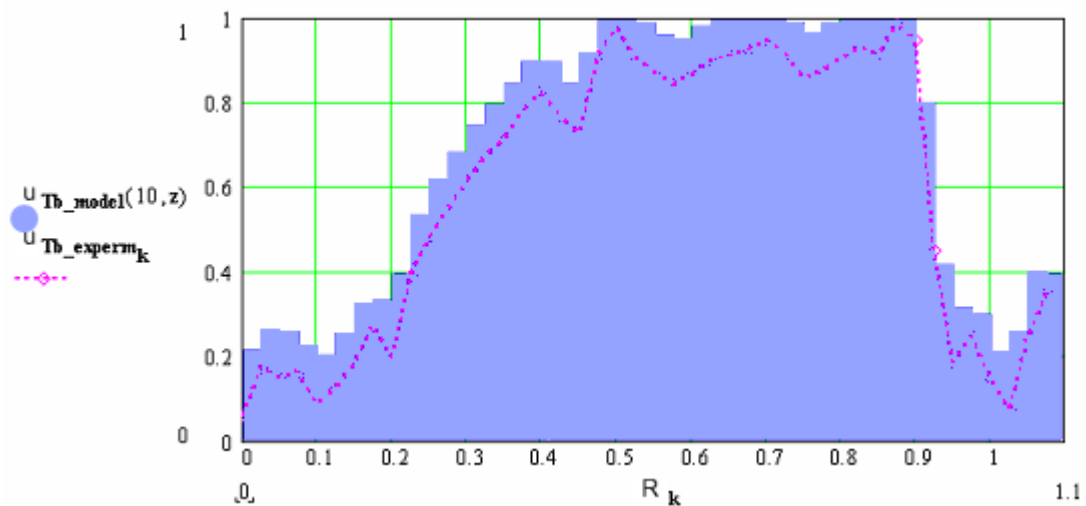


Рисунок 4.24. Модельний та експериментальний профілі концентрацій для ТЬ (швидкість наплення 0.0137 nm/s)

Для швидкостей 0.00837 nm/s (рис. 4.23) та 0.0137 nm/s (рис. 4.24) видно деякі відхилення модельного профілю від експериментального, проте похибка знаходиться в межах 5-9 %.

### **4.3 Математичне моделювання дифузійного перенесення в багат шарових наноплівках оксидної структури**

Даний підрозділ роботи відображає результати моделювання процесу формування мультишарів тонких оксидних наноплівок, що використовуються як термо- і агресивно захисні покриття робочих органів технологічного обладнання, що працює у високо агресивних середовищах. Сплави системи залізо-хром використовують як конструкційний матеріал в атомній енергетиці, при виробництві мінеральних волокон. Оксиди, у тому числі й багат шарові, широко застосовуються в напівпровідниковій техніці. Утворення на поверхні багат шарових оксидів забезпечує високу жаростійкість в інтервалі 1000°-1300°C. Хімічний склад оксидів визначається такими компонентами, як Cr, Al, Si, PЗМ. Серед інших інтерес викликають сплави (мас. %) Fe-35Cr-(0,5;3) Al. При вмісті 0.5 % Al на поверхні сплаву утворюються оксиди за схемою Me-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-FeCrO. Якщо вміст Al підвищений до 3%, то оксиди розташовуються за такою схемою: Me-FeCrO-AlO. При цьому різко зростає жаростійкість сплаву, оскільки утворення зовнішніх оксидів алюмінію перешкоджає проникненню кисню у внутрішні шари. Загальна товщина окалини при цьому зменшується у 3-4 рази. Визначення дифузійних характеристик дозволяє скоригувати хімічний склад сплавів і прогнозувати ресурс їх роботи. В працях Василюка П.М., Гаврилюка В.П., Петрика М.Р., Шаблія О.М., експериментально вивчалися дифузійні ефекти в багат шарових тонких оксидних плівках Me-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-FeCr<sub>2</sub>O<sub>4</sub> та Me-FeCr<sub>2</sub>O<sub>4</sub>-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, які запропоновані для використання як ефективні термо- та корозійностійкі нанопокриття робочих вузлів обладнання, що працюють в високотемпературних та агресивних середовищах (рідке скло, виготовлення оптоволокон, базальтоволокон тощо), забезпечуючи економію матеріалів. При виборі моделі враховували типорозміри деталі.

#### 4.3.1. Математичне моделювання дифузійного перенесення в багат шарових наноплівках оксидної структури при дослідженні зразка за технологією виробництва базальтового волокна (БСТВ)

Схематичний вигляд досліджуваного зразка за технологією виробництва базальтового волокна (БСТВ) зображений на рис. 4.25.

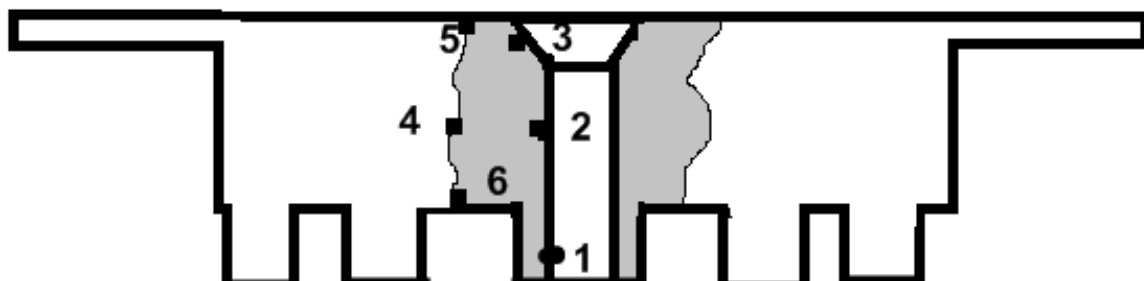


Рис. 4.25. Схематичний вигляд зразка

З метою одержання повноти картини аналізу вибрано шість позицій (точок), у яких здійснювались експериментальні зрізи (заміри) щодо кількісного складу означених вище компонентів. Розподіл елементів сплаву за технологією виробництва базальтового волокна з робочою температурою 1573 К вивчали в точках: 1 – межа сплав-повітря-розплав; 2,4 – об'єм сплаву; 6 – межа сплав-повітря; 5 – межа сплав-розплав. Точки для зрізів вибирались з урахуванням ступеню контакту з агресивним робочим середовищем (розплав скла) поверхні, покритою наноплівкою даної оксидної структури. Точки Т.1-Т.3 є точками безпосереднього контакту з агресивним середовищем, ранжовані в порядку зменшення ступеню контакту з агресивним середовищем. Точки Т.4-Т.6 не мають безпосереднього контакту з агресивним середовищем, однак розміщені в безпосередній близькості до нього і внаслідок цього піддаються значним термічним навантаженням. Аналогічно, точки Т.4-Т.6 також ранжовані в порядку зменшення ступеню термічного навантаження. Експериментальні концентраційні розподіли у відповідних точках використані як вхідні параметри для математичного моделювання процесу дифузії.

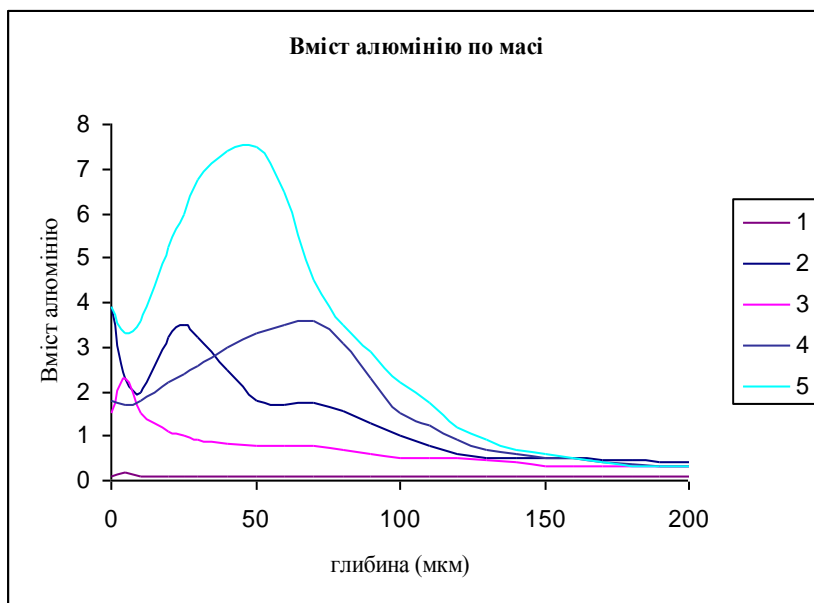


Рис. 4.26. Експериментальні концентраційні розподіли як функції глибини для алюмінію для 5-ти різних зрізів оксидної наноплівки

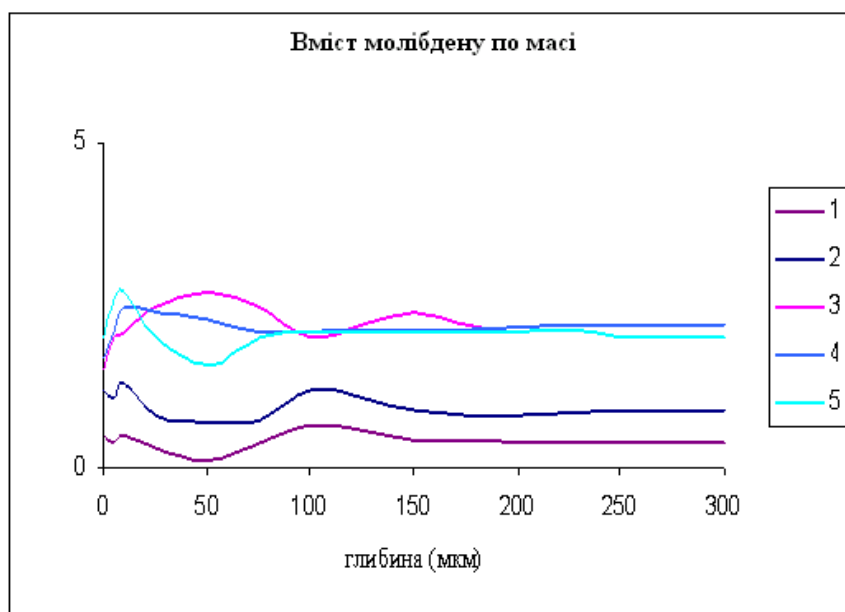


Рис. 4.27. Експериментальні концентраційні розподіли як функції глибини для молібдену для 5-ти різних зрізів оксидної наноплівки

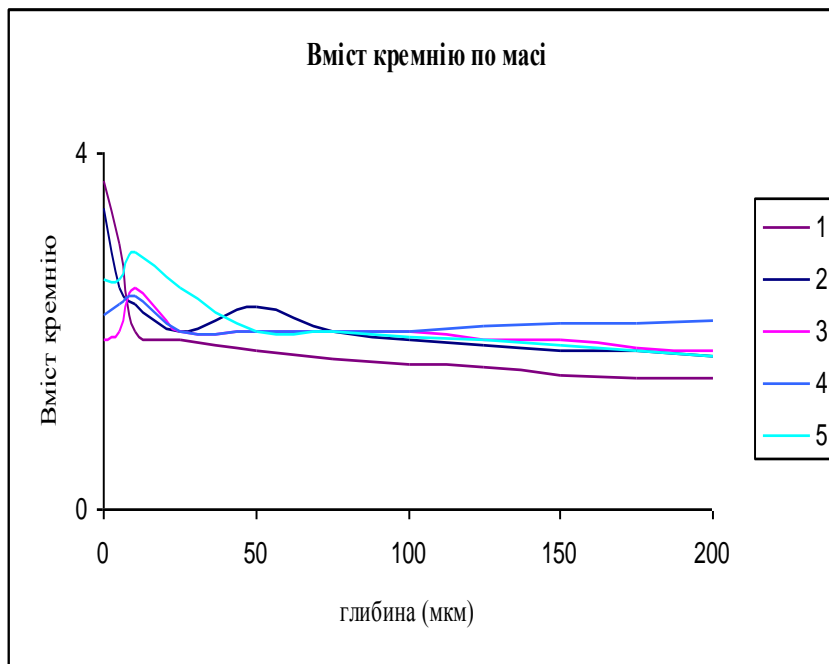


Рис. 4.28. Експериментальні концентраційні розподіли як функції глибини для кремнію для 5-ти різних зрізів оксидної наноплівки

При побудові математичної моделі дифузійного перенесення в даних оксидних плівках розглядається багатошарове (складається з  $n$  шарів) середовище. Припустивши, що процес дифузії атомів складових компонентів оксидних плівок (алюміній, молібден, кремній) головна причина змішування системи, то концентраційні профілі для такої багатошарової системи можна одержати з рівнянь Фіка, в комбінації з крайовими умовами зовнішніх шарів і умовами контакту між послідовними шарами. Таким чином, отримаємо математичну модель процесу перенесення шляхом дифузії в плоскому багатошаровому середовищі. Значення місцевої миттєвої концентрації  $C_k(t, x, z)$  отримаємо як розв'язок системи диференціальних рівнянь другого порядку

$$\frac{\partial}{\partial t} C_k(t, x, z) + \gamma_k^2 C_k = D_0 \frac{\partial^2 C_k}{\partial x^2} + D_{z_k} \frac{\partial^2 C_k}{\partial z^2}; \quad (4.22)$$

в області  $I_n = \left\{ t > 0, x \in (0, R), z : z \in \bigcup_{k=1}^{n+1} (l_{k-1}, l_k); l_0 \geq 0; l_{n+1} = \infty \right\}$ ,

де  $D_k$  - коефіцієнти дифузії елементу, а  $\gamma_k^2$  - коефіцієнт розсіювання маси.

Відповідні початкові умови мають вигляд:

$$C_k(t, x, z)|_{t=0} = C_{0k}(x, z) \equiv C_{0k}(z), \quad k = \overline{1, n}. \quad (4.23)$$

Крайові умови та інтерфейсні умови між суміжними шарами вздовж осі  $z$ :

$$\left[ \alpha_{11}^0 \frac{d}{dz} + \beta_{11}^0 \right] C_1(t, x, z)|_{z=l_0} = C_{l_0}(t, x); \quad \frac{\partial C_{n+1}}{\partial z}|_{z=\infty} = 0$$

$$\left[ \left[ \alpha_{j1}^k \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{j1}^k \right] C_k - \left[ \alpha_{j2}^k \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{j2}^k \right] C_{k+1} \right]_{z=l_k} = 0, \quad j = \overline{1, 2}; k = \overline{1, n}. \quad (4.24)$$

Крайові умови по змінній  $x$ :  $\frac{\partial C_k}{\partial x}|_{x=0} = 0, C_k|_{x=R} = C_{1k}(t, z)$ .

Тут використані позначення:

$\alpha_{ij}^k, \beta_{ij}^k; k = \overline{0, n}; i, j = \overline{1, 2}$  – коефіцієнти, що визначають крайові умови і умови

контакту. (В нашому випадку:  $\alpha_{11}^0 = 0, \beta_{11}^0 = 1; \beta_{11}^k = \beta_{12}^k = 1; \beta_{21}^k = \beta_{22}^k = 0;$

$\alpha_{11}^k = \alpha_{12}^k = 0; \alpha_{21}^k = \alpha_{22}^k = 1; k = \overline{1, n}$ );

$C_k, k = \overline{1, n+1}$  – концентрація в  $k$ -му шарі багат шарового середовища вздовж осі  $z$ ;

$x, y, z$  – просторові координати;

$t$  – час;

$\gamma_k^2$  – коефіцієнт розсіювання маси; (в першому наближенні:  $\gamma_k^2 = 0; k = \overline{1, n+1}$ );

$D_k, k = \overline{1, n+1}$  – коефіцієнт дифузії в напрямку осі  $z$ ;

$D_0$  – коефіцієнт дифузії в напрямку осі  $x$ ;

$\Delta l_k = l_k - l_{k-1}; k = \overline{1, n+1}$  – товщина  $k$ -го шару;  $l = l_{n+1} - l_0$  – товщина середовища;

$R$  – півширина середовища.

Точний аналітичний розв'язок задачі описаної рівняннями (4.59) – (4.61) безпосередньо виписується шляхом застосування інтегральних перетворень Фур'є, аналогічно пункту 4.2 [113]:

$$C_k(t, x, z) = \int_0^t \int_0^R W_{l_0, k}(t - \tau; x, \zeta; z) C_{l_0}(\tau, \zeta) d\zeta d\tau + \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_0^t \int_0^r \int_0^{l_{k_1}} H_{k, k_1}(t - \tau; x, \zeta; z, \xi) \cdot C_{0_k}(\zeta, \xi) \cdot \delta_+(\tau) \sigma_{k_1} d\zeta d\xi d\tau +$$

$$+ \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_0^t \int_0^{l_{k_1-1}} W_{R, k_1}(t - \tau; x; z, \xi) \cdot C_{l_{k_1}}(\tau, \xi) \sigma_{k_1} d\xi d\tau. \quad (4.25)$$

Тут

- функція Гріна (функція впливу крайової умови для поверхні впливу  $z=l_0$

$$W_{l_0, k}(t, x; z, \xi) = \frac{2}{R} \sum_{m=0}^{\infty} W_{l_0, k}^m(t - \tau, z) (-1)^m \frac{\cos \eta_m \xi}{\eta_m}$$

- функція Гріна (функція впливу крайової умови для поверхні впливу  $x=R$ ):

$$W_{R, k_1}(t; x, \zeta; z, \xi) = \frac{2}{R} \sum_{m=0}^{\infty} e^{-D_0 \eta_m^2 t} D_0 (-1)^{m+1} \eta_m \varepsilon_{k, k_1}^m(t; z, \xi) (-1)^m \cdot \cos \eta_m x$$

- функція впливу Коші неоднорідностей системи:

$$H_{k, k_1}(t; x, \zeta; z, \xi) = \frac{2}{R} \sum_{m=0}^{\infty} \varepsilon_{k, k_1}^m(t, z, \xi) \cdot \cos \eta_m \xi \cdot \cos \eta_m x.$$

За результатами експериментальних даних та з використанням розв'язку (4.25) була проведена ідентифікація з використанням теорії управління станом багатокомпонентних систем (результати, отримані С.В. Дейнекою, М.Р. Петриком [43, 172]).

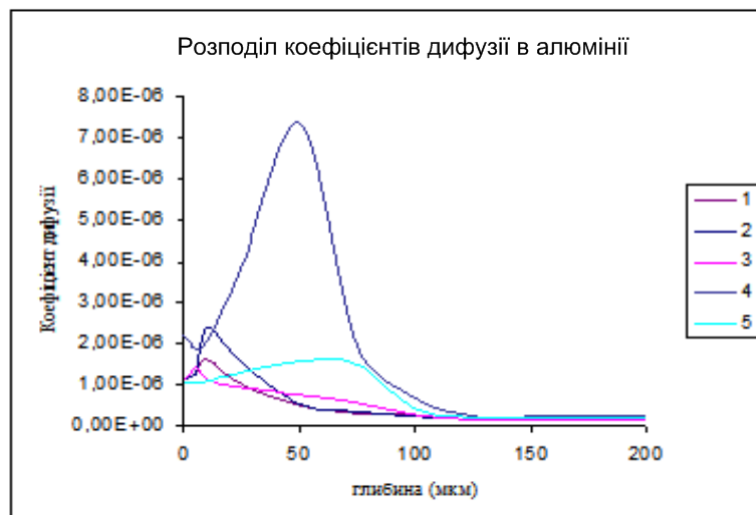


Рис. 4.29. Відновлені розподіли коефіцієнтів дифузії для алюмінію для 5-ти різних зрізів оксидної наноплівки

На рис. 4.33. – 4.35. подані, відтворені з використання методів оптимального керування станом багатокomпонентних систем переносу, аналітичного розв’язку моделі (4.62) та даних експериментальних спостережень (рис. 4.29 – 4.32), розподіли коефіцієнтів дифузії для розглядуваних складових компонентів наноплівки (алюмінію, молибдену, кремнію).

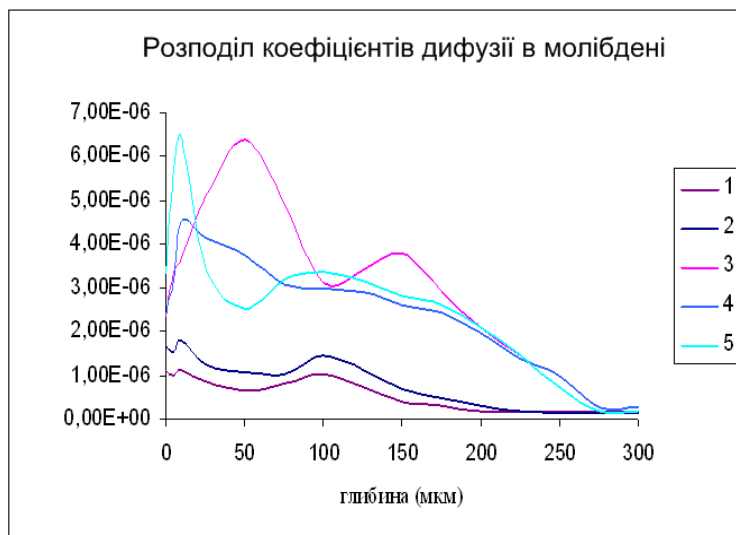


Рис. 4.30. Відновлені розподіли коефіцієнтів дифузії для молибдену для 5-ти різних зрізів оксидної наноплівки

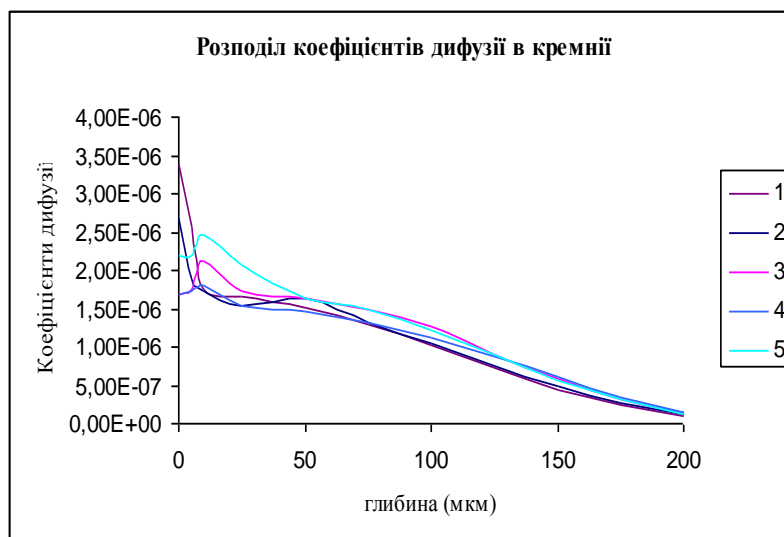


Рис. 4.31. Відновлені розподіли коефіцієнтів дифузії для кремнію для 5-ти різних зрізів оксидної наноплівки

Ідентифіковані у такий спосіб розподіли коефіцієнтів дифузії, що відповідають реальним даним експериментів, використані як вхідні параметри отриманого математичного розв’язку моделі (4.62) для моделювання та аналізу



концентраційних розподілів основних складових компонентів наноплівки (алюмінію, молібдену, кремнію).

Як жаро-, так і корозійна стійкість сплавів визначається вмістом, в першу чергу, алюмінію, який забезпечує утворення захисних поверхневих оксидів. Розглянемо результати комп'ютерного моделювання концентраційних розподілів алюмінію в кожній з п'яти точок.

На рис. 4.36 – 4.40 подано результати числового моделювання та використані сліди експериментальних спостережень (exp), що відображають вміст алюмінію. Ці концентраційні розподіли побудовані для різних часових тривалостей формування технологічного мультишару наноплівки: приведений час, рівний (1T) відповідає експериментальному часу (20 діб). Тривалості формування технологічного мультишару наноплівки за рахунок молекулярної дифузії вказаних компонентів розбиті на 5 періодів, що включають формування захисного мультишару від початкового періоду (0.25 T) до кінцевого (1 T).

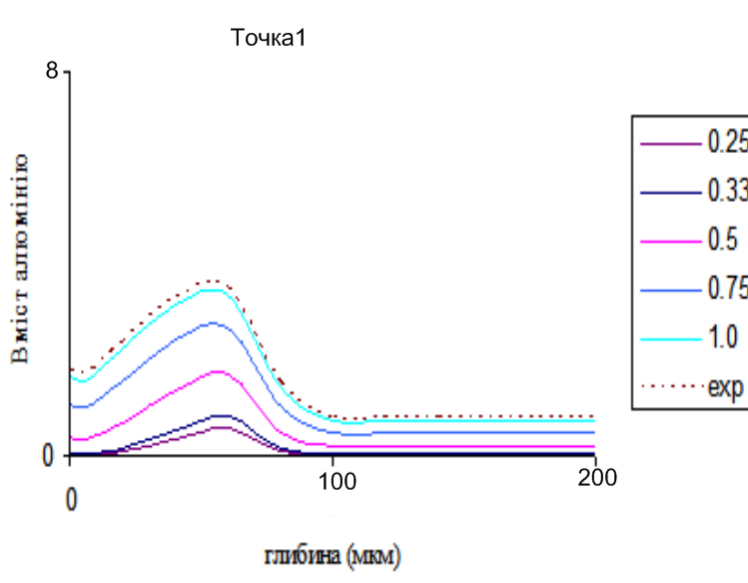


Рис. 4.32. Модельні концентраційні розподіли алюмінію для точки T.1

Як видно з графіка на рис. 4.36, для точки T.1. характерним є майже повне співпадання вмісту алюмінію на глибині більше 100 мкм при приведеному часі 0,25 T та 0,33 T (тобто на першій третині експерименту), причому цей вміст близький нулю. Найбільший приріст вмісту алюмінію спостерігається при приведеному часі від 0,33 T до 0,75 T.

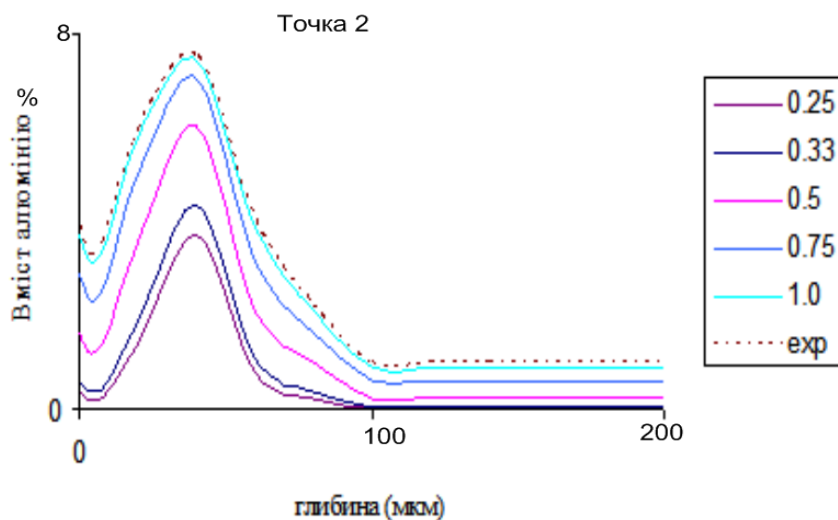


Рис. 4.34. Модельні концентраційні розподіли алюмінію для точки Т.2

Максимальне відхилення концентрації алюмінію для періоду завершення формування захисного мультишару наноплівки від експериментального профілю не перевищує 2-3 %, що дає змогу говорити про достовірність математичної моделі та можливості практичного використання отриманих результатів.

На рис. 4.33 спостерігаємо, що для точки Т.2. найбільший приріст вмісту алюмінію спостерігається при приведеному часі від 0,33 Т до 0,5 Т. Максимальне відхилення концентрації алюмінію для періоду 1 Т від exp дорівнює близько 3%.

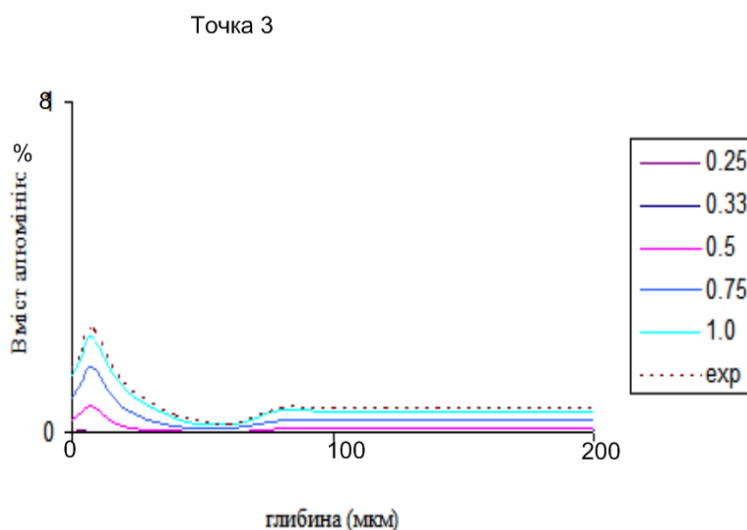


Рис. 4.34. Модельні концентраційні розподіли алюмінію для точки Т.3

З графіка на рис. 4.34, видно, що для точки Т.3. характерним є найбільший приріст вмісту алюмінію при приведеному часі від 0,5 Т до 0,75 Т.

Для точки Т.4 концентрація алюмінію є стала і рівна близько 0,65 %. Це можна пояснити тим, що ця точка має найменший ступінь термічного навантаження (рис. 4.25.).

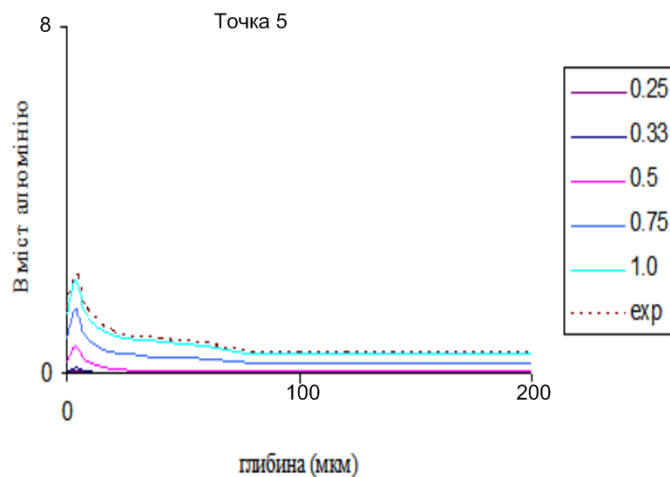


Рис. 4.35. Модельні концентраційні розподіли алюмінію для точки Т.5

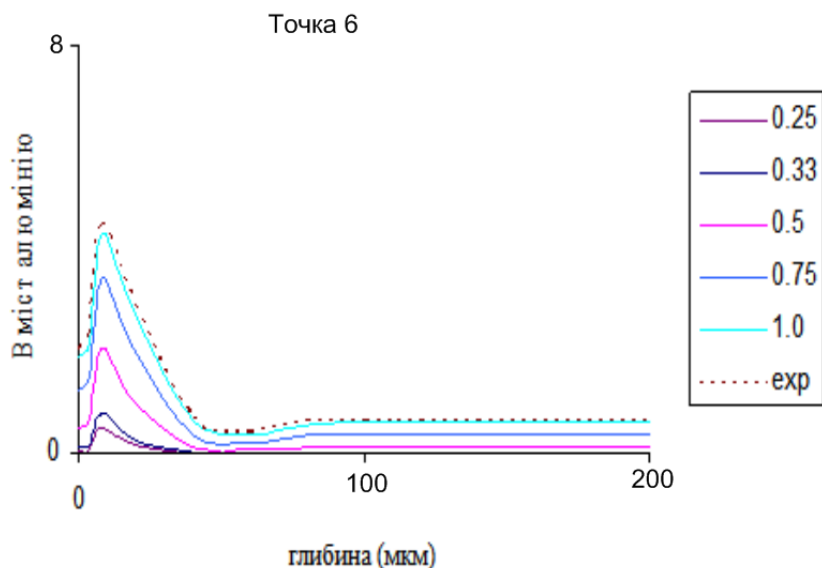


Рис. 4.36 Модельні концентраційні розподіли алюмінію для точки Т.6

Як видно з рис. 4.32 – 4.36 профілі, одержані шляхом моделювання, є добре узгоджені з відповідним експериментальним профілем при наближенні тривалості формування мультишару до періоду кінцевого завершення формування захисного мультишару наноплівки. Максимальне відхилення не

перевищує 2-3 %, що дає змогу говорити про достовірність математичної моделі та можливості практичного використання отриманих результатів.

Розглянемо результати комп'ютерного моделювання концентраційних розподілів молибдену в кожній з п'яти точок, які подані на рис. 4.37 – 4.42, для аналізу на кожному з графіків зображені також експериментальні дані (exp).

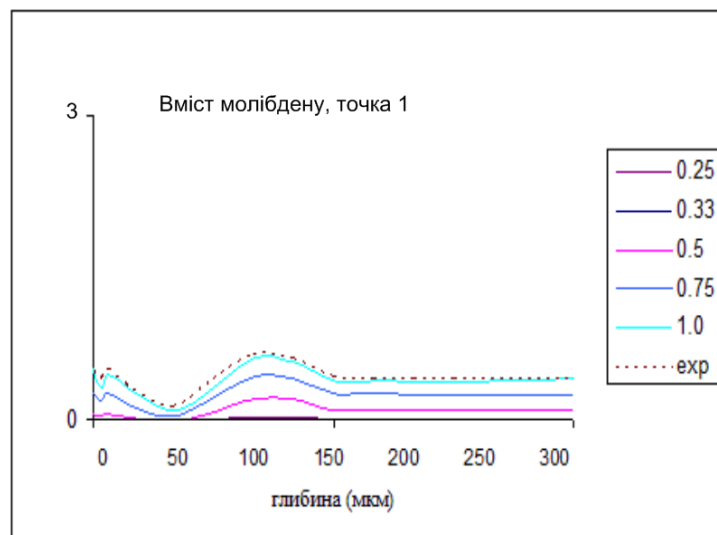


Рис. 4.37 Модельні концентраційні розподіли молибдену для точки Т.1

Як і для алюмінію, для молибдену часові тривалості формування технологічного мультишару наноплівки (20 діб) були розбиті на 5 періодів. В точці Т.1. зростання вмісту молибдену починається при експлуатації протягом більше 6 діб (0,33 Т). На глибині, більшій від 150 мкм концентрація молибдену практично стала.

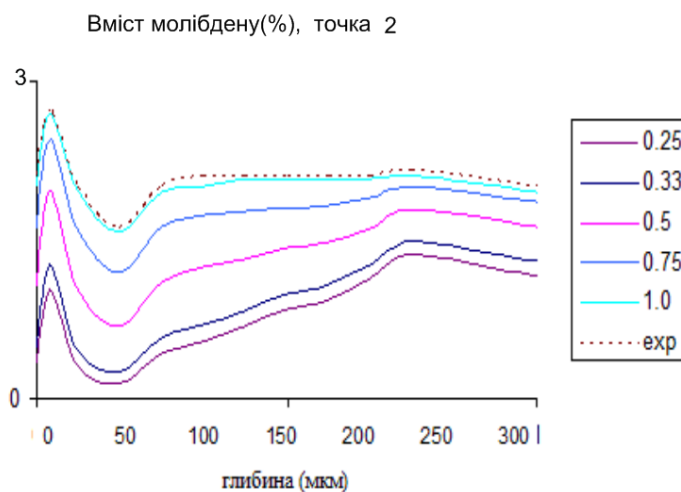


Рис. 4.38 Модельні концентраційні розподіли молибдену для точки Т.2

На рис. 4.38 спостерігаємо, що для точки Т.2. найбільший приріст вмісту молибдену спостерігається при приведеному часі від 0,33 Т до 1Т. Максимальне відхилення концентрації алюмінію для періоду 1Т від ехр дорівнює близько 3%.

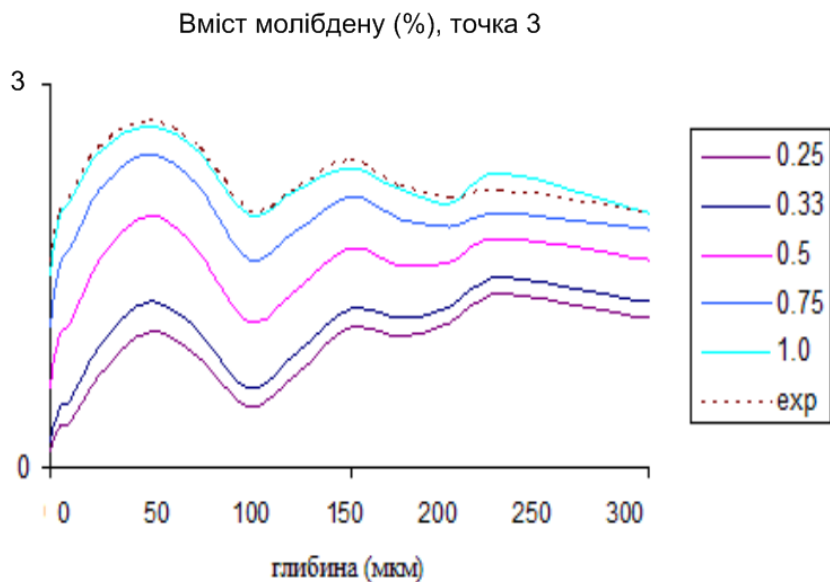


Рис. 4.39 Моделльні концентраційні розподіли молибдену для точки Т.3

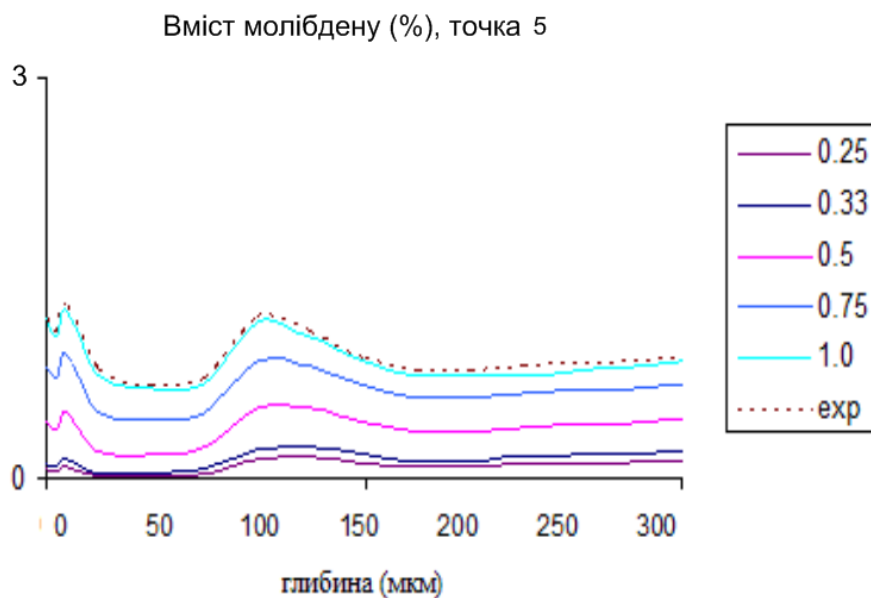


Рис. 4.40 Моделльні концентраційні розподіли молибдену для точки Т.5

З графіка на рис. 4.40, видно, що для точки Т.5. характерним є найменший приріст вмісту молибдену при приведеному часі від 0,25Т (5 діб) до 0,33Т (7 діб). Похибка модельних результатів (співвідносно з експериментальними)

на глибині до 100 мкм – 1 %, на глибині від 100 до 200 мкм – 1,5-2 %, на глибині від 200 до 300 мкм – 1,5-3 %.

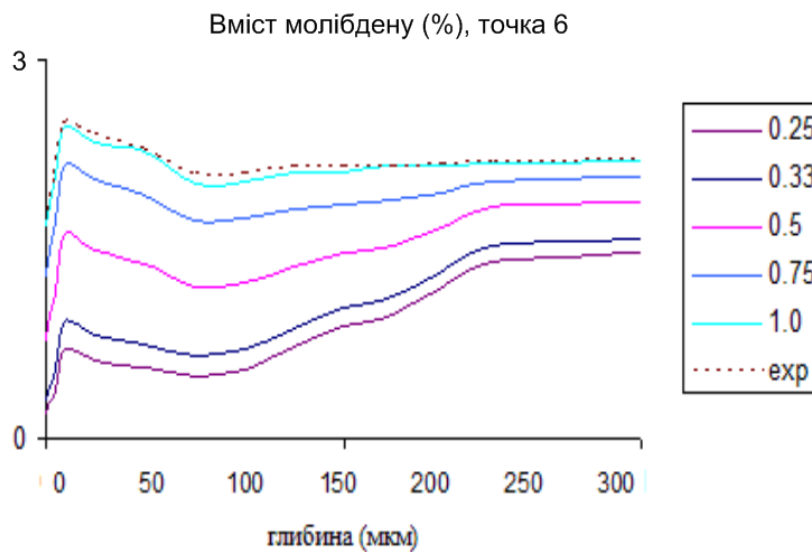


Рис. 4.41 Модельні концентраційні розподіли молібдену для точки Т.6

Як демонструють результати моделювання для точки Т.6. концентрація молібдену для кожного з експлуатаційного періоду є сталою на глибині від поверхні зразка від 230 мкм.

Аналізуючи графіки на рис. 4.37 – 4.41 можна зробити висновок, що модельні профілі узгоджуються з відповідними експериментальними профілями (відхилення в межах 2-3 %).

На рис. 4.42 – 4.46 розглядаються результати комп'ютерного моделювання вмісту кремнію в кожній з п'яти точок, де проводився експериментальний аналіз (exp).

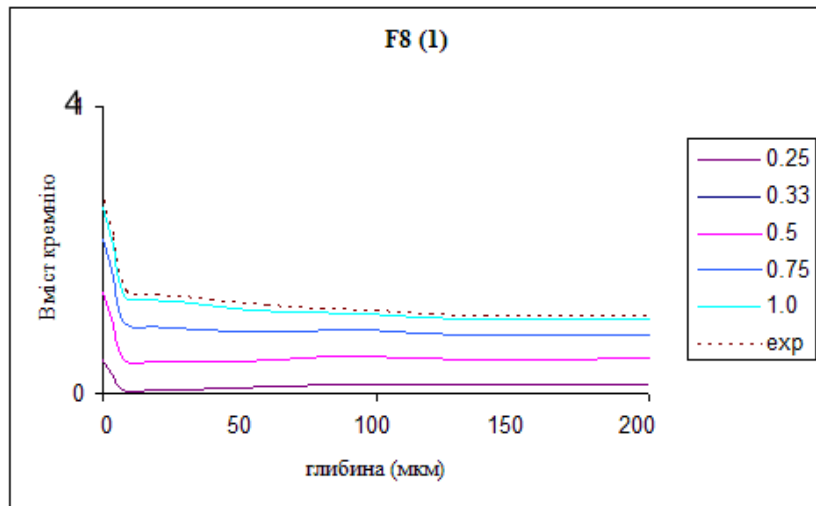


Рис. 4.42 Модельні концентраційні розподіли кремнію для точки Т.1

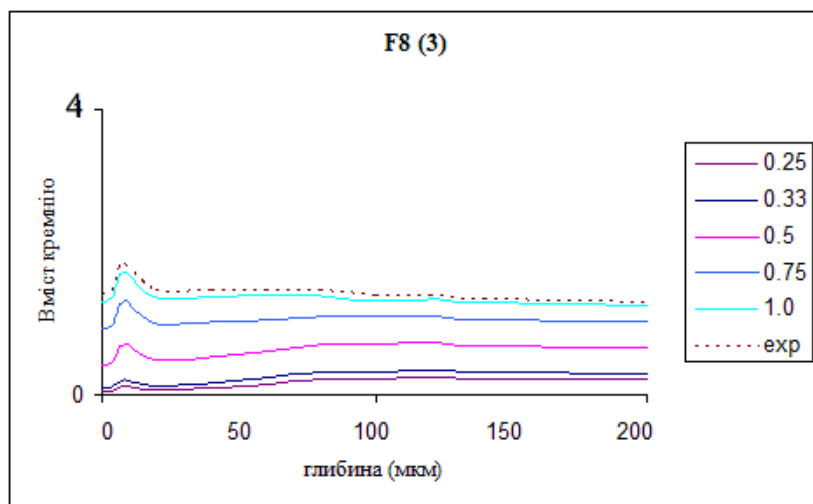


Рис. 4.43 Модельні концентраційні розподіли кремнію для точки Т.2

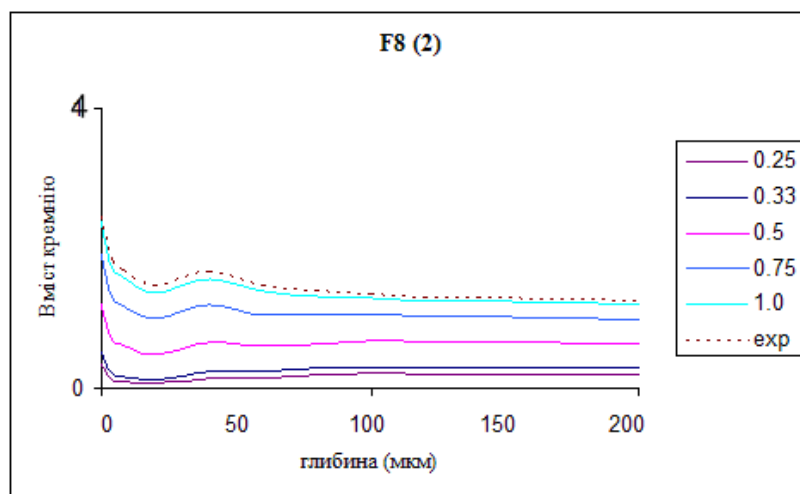


Рис. 4.44 Модельні концентраційні розподіли кремнію для точки Т.3

В точках Т.1. – Т.3. зростання вмісту кремнію починається при експлуатації протягом більше 6 діб (0,33 Т). На глибині, більшій від 100 мкм (для Т.1.), більшій 130 мкм (для Т.2.), більшій 110 мкм (для Т.3.), більшій 160 мкм (для Т.5.), більшій 130 мкм (для Т.6.), концентрація кремнію практично стала.

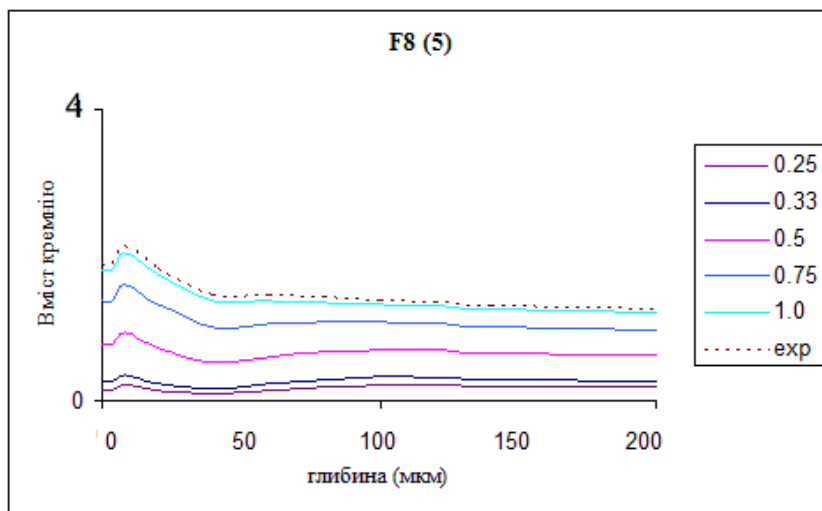


Рис. 4.45 Модельні концентраційні розподіли кремнію для точки Т.5

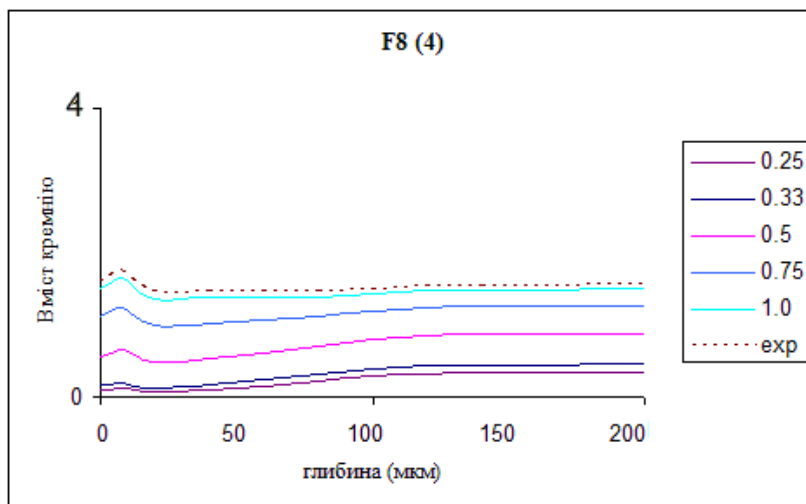


Рис. 4.46 Модельні концентраційні розподіли кремнію для точки Т.6

Як видно з рис. 4.42 – 4.46 профілі, одержані шляхом моделювання концентраційних розподілів кремнію добре узгоджуються з відповідним експериментальним профілем при наближенні тривалості формування мультишару до періоду кінцевого завершення формування захисного



мультишару наноплівки. Максимальне відхилення не перевищує 2-3 %, що дає змогу говорити про достовірність математичної моделі та можливості практичного використання отриманих результатів. Результати моделювання можуть бути використані для підвищення ефективності експериментальних досліджень переносу в багатокомпонентних мультикомпозиатах та дослідженні властивостей нових наноматеріалів.

#### **4.3.2. Математичне моделювання дифузійного перенесення в багат шарових наноплівках оксидної структури при дослідженні зразка за технологією виробництва базальтового волокна, отриманого вертикальним роздувом повітря (ВРВ)**

Схематичний вигляд зразка за технологією виробництва базальтового волокна, отриманого вертикальним роздувом повітря (ВРВ) зображений на рис. 4.47.

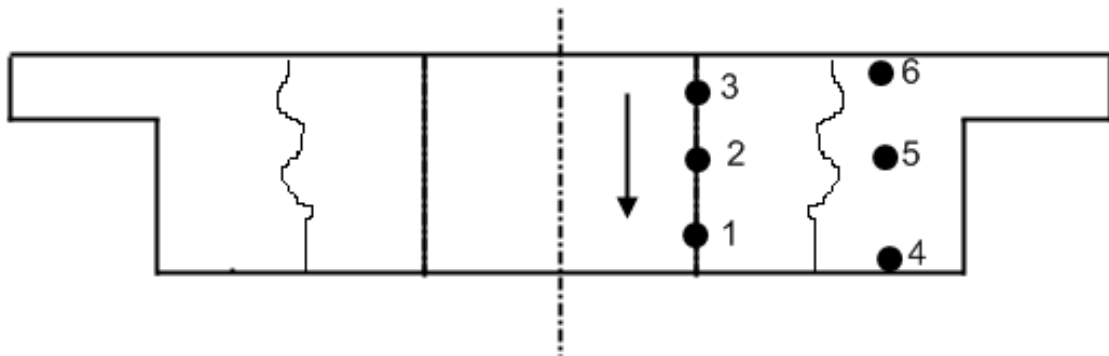


Рис. 4.47 Схематичний вигляд зразка за технологією ВРВ

Експериментальні зрізи (заміри) щодо кількісного складу алюмінію та кремнію вивчали в точках: 1-межа сплав-повітря-розплав; 2,5, - об'єм сплаву; 4-межа сплав-повітря; 6- межа сплав-розплав. Зразок експлуатувався біля 30 діб.

Експериментальні концентраційні розподіли як функції від глибини для кремнію та алюмінію для 5-ти різних зрізів оксидної наноплівки подано на рис.4.48 – 4.49.

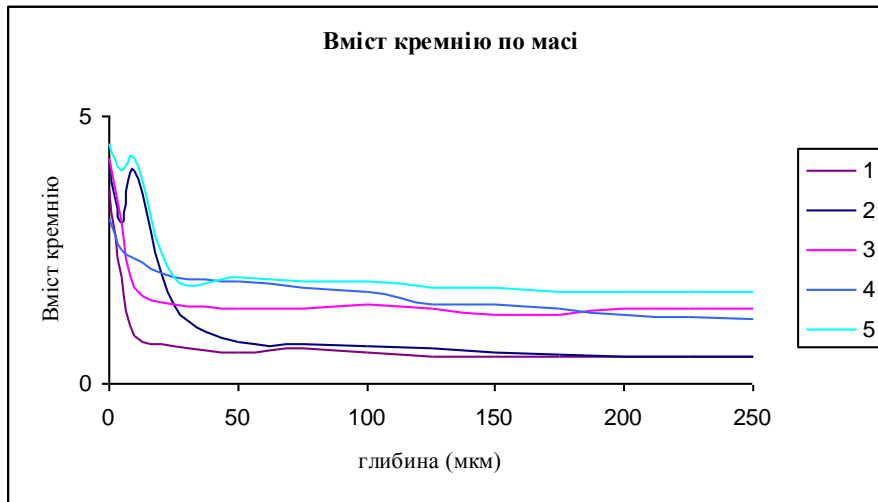


Рис. 4.48 Експериментальні концентраційні розподіли для кремнію

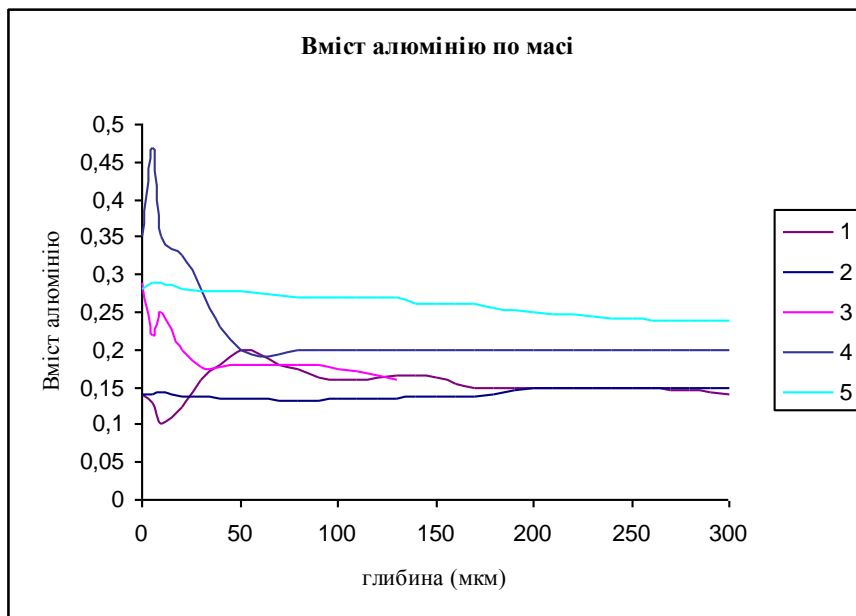


Рис. 4.49 Експериментальні концентраційні розподіли для алюмінію

На рис. 4.50 – 4.51 показані отримані в результаті реалізації процедури зворотної задачі (результати С.В. Дейнеки, М.Р. Петрика), з використанням аналітичного розв'язку моделі (4.62) та даних експериментальних спостережень розподіли коефіцієнтів дифузії кремнію та алюмінію.

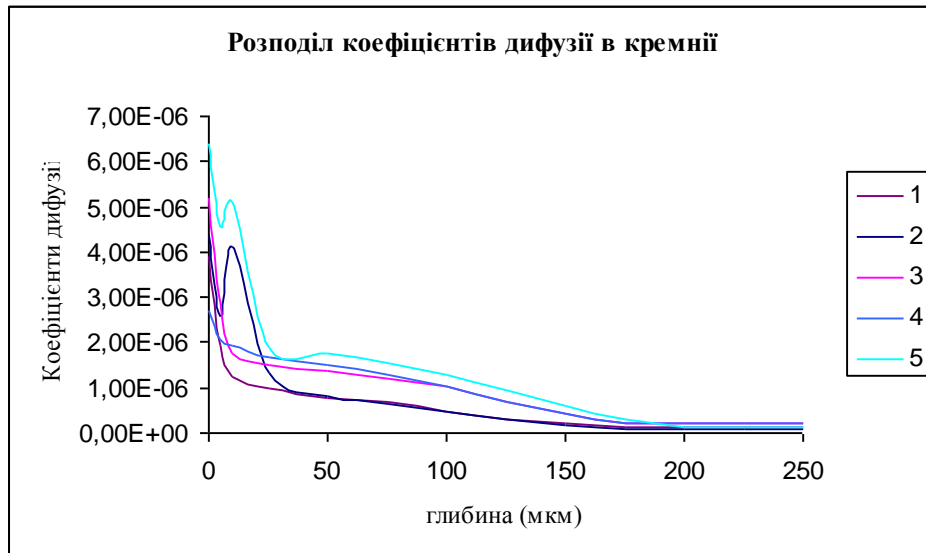


Рис. 4.50 Розподіл коефіцієнтів дифузії в кремнії

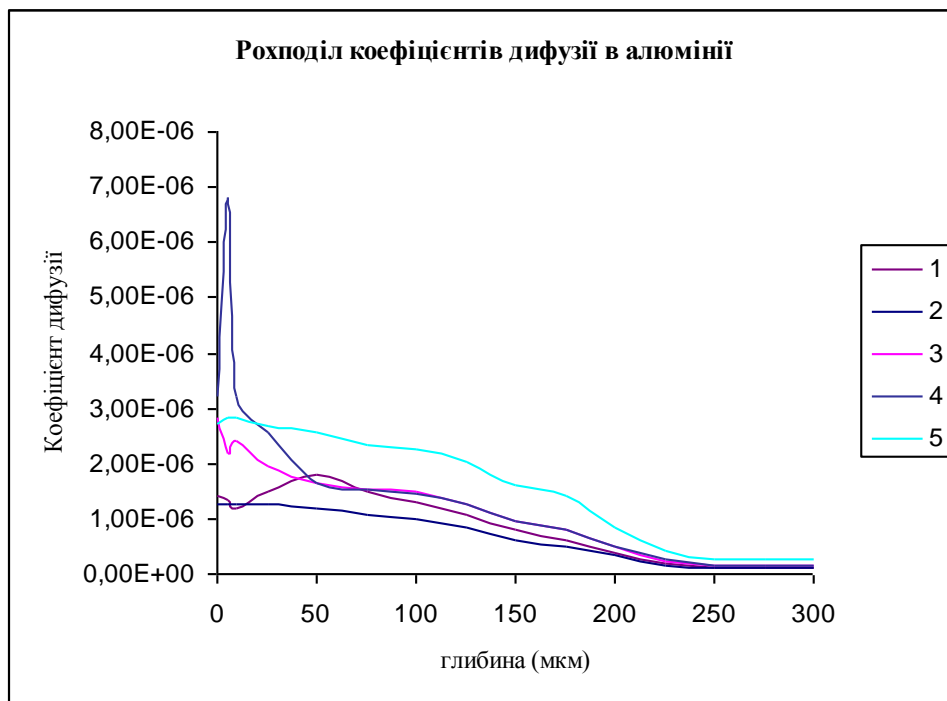


Рис. 4.51 Розподіл коефіцієнтів дифузії в алюмінії

Використовуючи отриманий коефіцієнтний розподіл та аналітичний розв'язок моделі, проведемо порівняльний аналіз експериментального і модельного розподілу.

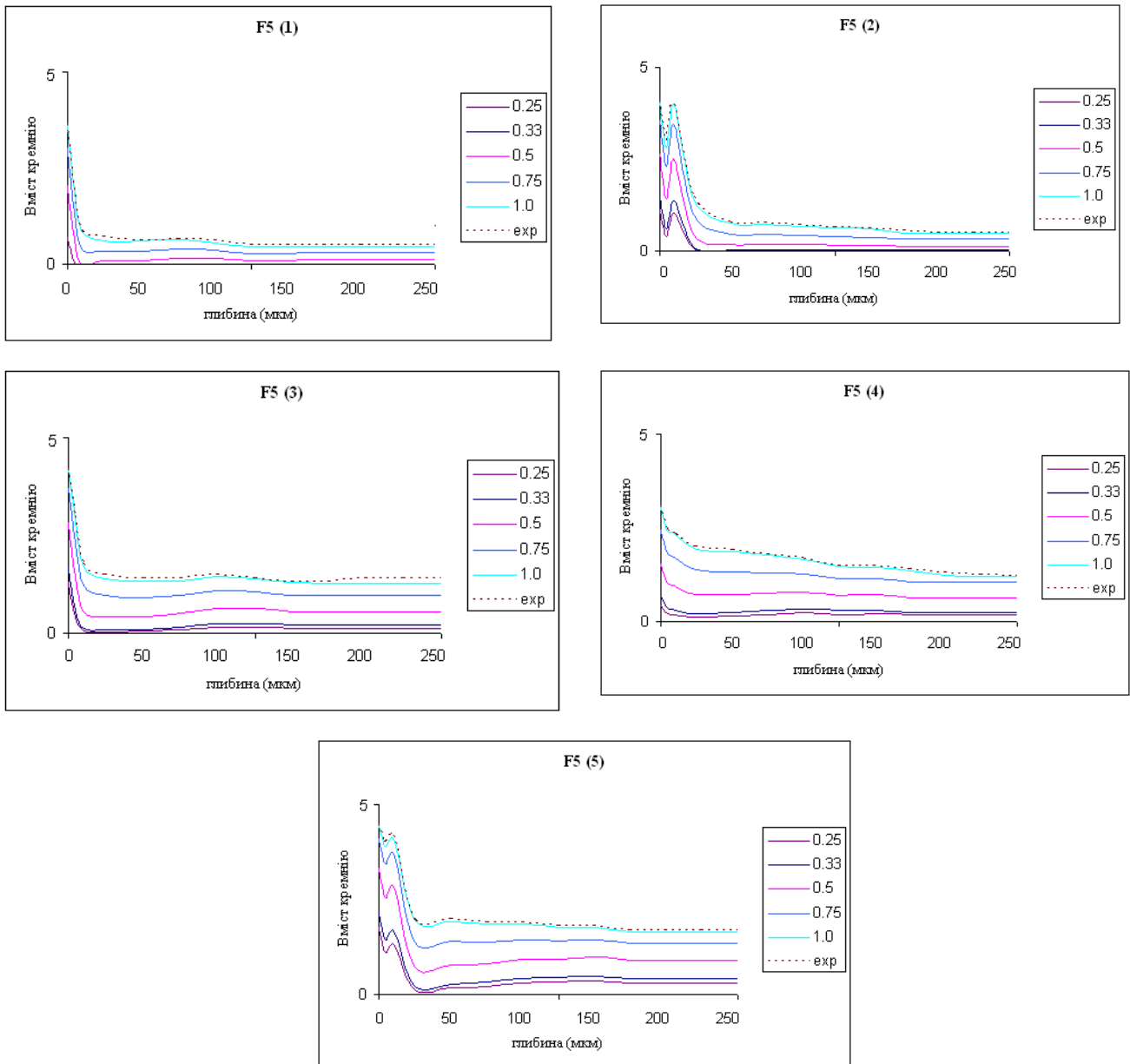


Рис. 4.52. Модельні концентраційні розподіли, побудовані за відновленими коефіцієнтами дифузії для кремнію для 5-ти зрізів оксидної наноплівки (точки Т.1-Т.4, Т.6)

Як видно з рис. 4.52. криві експериментального і модельного розподілів кремнію з достатньої для технологічних застосувань точністю узгоджуються між собою. Максимальне значення величини відносної похибки не перевищує 4 %.

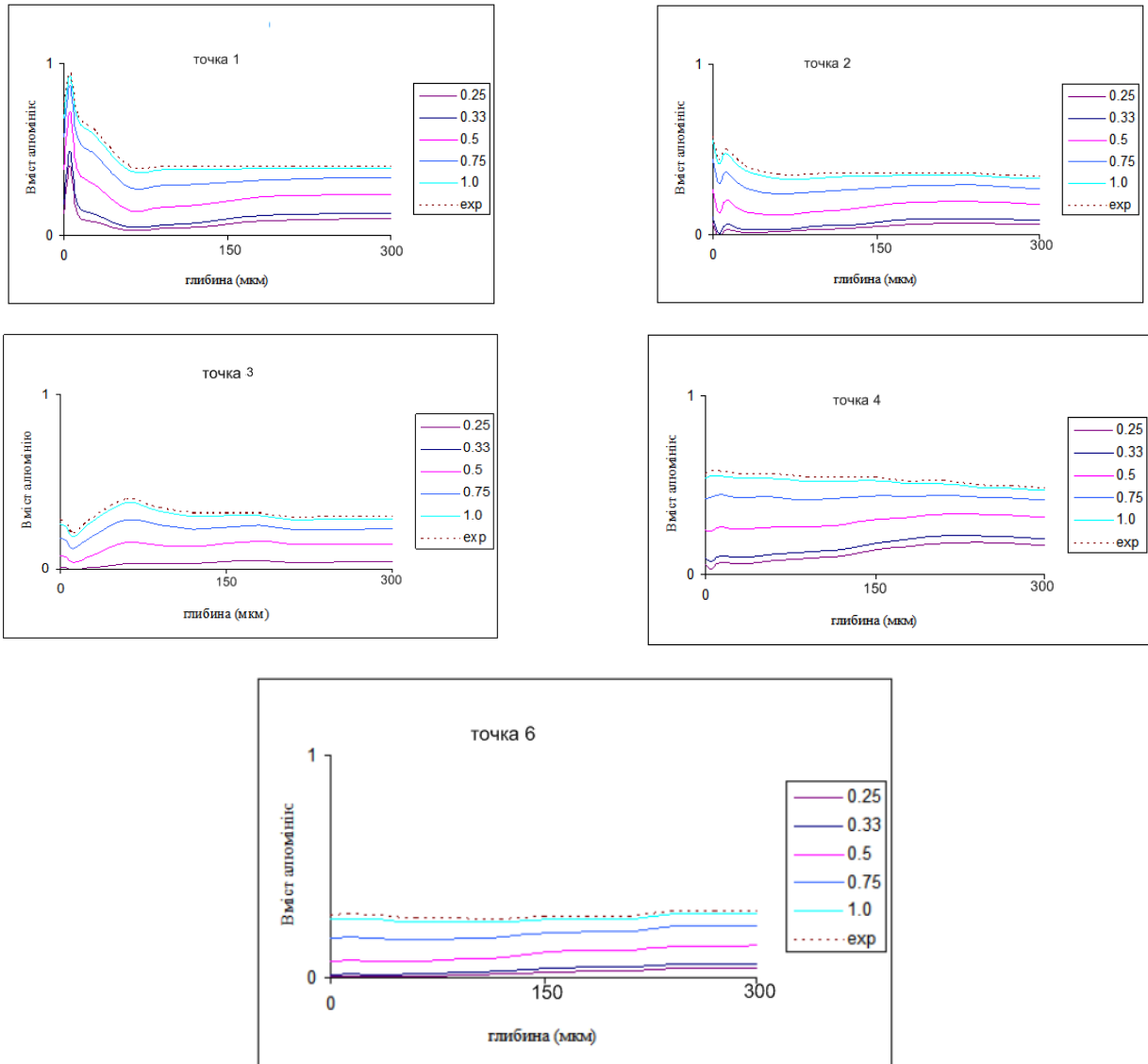


Рис. 4.53. Модельні концентраційні розподіли, побудовані за відновленими коефіцієнтами дифузії для алюмінію для 5-ти зрізів оксидної наноплівки (точки Т.1-Т.4, Т.6)

На рис. 4.53 спостерігаємо, що на глибині більшій за 140 мкм від поверхні зразка концентрація алюмінію для кожної з точок Т.1-Т.4, Т.6 при відповідних періодах часу залишається незмінною. Для всіх точок, що відповідають досліджуваним зрізам оксидної наноплівки, найбільший приріст вмісту алюмінію спостерігається при приведеному часі від  $0,33T$  (10 доба) до  $1T$  (30 доба). Максимальне відхилення концентрації алюмінію для повного модельного періоду часу від часу проведення експерименту не перевищує 5 %.

## РОЗДІЛ 5

### МОДЕЛЮВАННЯ ТА ІДЕНТИФІКАЦІЯ ПАРАМЕТРІВ ПРОЦЕСІВ ДИFUЗІЙНОГО ПЕРЕНЕСЕННЯ В БАГАТОШАРОВИХ ОКСИДНИХ НАНОПЛІВКАХ

Задачі вивчення дифузії в багатошарових плівках вимагають розроблення нових методів моделювання і математичних моделей для опису явищ, що враховують наявність переходів (інтерфейсів) між суміжними шарами [1, 2]. Ефективними методами, які найповніше враховують проаналізовані вище особливості, є методи інтегральних перетворень Фур'є, Лапласа, Фур'є-Бесселя, Вебера, Ганкеля, Конторовича – Лебедева, з використанням яких отримані розв'язки різних типів краєвих задач математичної фізики однорідних структур, у тому числі задачі дифузії для різних середовищ та можливість їх математичного моделювання

#### **5.1 Математичне модель багатошарової оксидної наноплівки**

Для формулювання фізичної задачі і математичної моделі процесу дифузійного масопереносу в багатошарових плівках розглянемо багатошарове середовище, що складається з  $n$  подвійних шарів двох середовищ з різними властивостями. Схематичний вигляд багатошарового середовища наведено на рисунку 5.1.

Згідно такої схематизації, для кожного  $j$ -го інтерфейсу у сформованому мультикомполіті відбувається взаємодифузія компонент між двома сусідніми шарами середовища. Механізми такого взаємопереносу визначаються наявністю змінних градієнтів та швидкостей зміни концентрацій на інтерфейсних межах між шарами. Моделювати механізми такого додаткового взаємопереносу поряд із основними рівняннями переносу можна шляхом врахування в крайових та інтерфейсних умовах зміни в часі концентрацій та їх градієнтів.

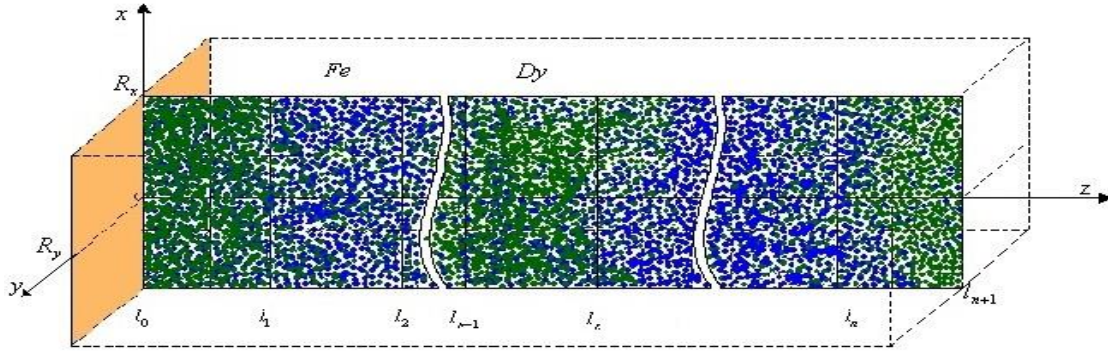


Рис. 5.1. Схематизація мультикомпозитного багатошарового середовища

Таким чином нам необхідно побудувати обмежений розв'язок системи диференціальних рівнянь з частинними похідними 2-го порядку параболічного типу, що описує дифузійний перенос (молекулярний транспорт) в обмеженому  $(n+1)$ -шаровому неоднорідному середовищі з нестационарними режимами масообміну на масообмінних поверхнях:

$$\frac{\partial u_m(t, x, z)}{\partial t} = D_R \frac{\partial^2 u_m(t, x, z)}{\partial x^2} + D_m \frac{\partial^2 u_m(t, x, z)}{\partial z^2} + f_m(t, z), z \in (l_{m-1}, l_m), m = \overline{1, n+1} \quad (5.1)$$

за початкових умов

$$u_m(t, x, z)|_{t=0} = g_m(x, z), z \in (l_{m-1}, l_m), m = \overline{1, n+1}, \quad (5.2)$$

крайових умов по змінній  $z$

$$\left[ \alpha_{11}^0 \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{11}^0 \right] u_1(t, x, z) \Big|_{z=l_0} = g_{l_0}(t, x); \quad \left[ \alpha_{22}^{n+1} \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{22}^{n+1} \right] u_{n+1}(t, x, z) \Big|_{z=l_{n+1}} = g_l(t, x), \quad (5.3)$$

інтерфейсних умов

$$\left\{ \left[ \alpha_{j1}^m \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{j1}^m \right] u_{m+1}(t, x, z) - \left[ \alpha_{j2}^m \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{j2}^m \right] u_{m+1}(t, x, z) \right\} \Big|_{z=l_m} = 0; \quad j = \overline{1, 2}; \quad m = \overline{1, n} \quad (5.4)$$

та крайових умов по змінній  $x$

$$u_m(t, x, z) \Big|_{x=0} = u_{0_m}(t, z), \quad u_m(t, x, z) \Big|_{x=R} = u_{R_m}(t, z), \quad x \in (0, R), m = \overline{1, n+1}. \quad (5.5)$$

Тут  $D_R$  – коефіцієнт дифузії по координаті  $x$ ,  $D_m$  – коефіцієнти дифузії по координаті  $z$  для кожного з  $n$  шарів середовища. Умови (5.3) – (5.4) подані в загальному вигляді і через вибір необхідних коефіцієнтів  $\alpha_{js}^m, \beta_{js}^m, j, s = \overline{1, 2}$

уточнюються для кожної конкретної постановки моделі. Також є можливість враховувати і вплив просторово розподілених джерел маси  $f_m(t, z)$ .

## 5.2 Побудова аналітичного розв'язку моделі

Для побудови розв'язку запропонованої моделі, послідовно застосуємо до задачі (5.1) – (5.5) інтегральні перетворення:

а) інтегральне перетворення  $\sin$ -Фур'є на сегменті  $(0, R)$  по змінній  $x$ , визначене [4]:

- інтегральним оператором прямої дії

$$F_i[u_m(t, x, z)] = \int_0^h u_m(t, x, z) \sin\left(\frac{i\pi}{h}x\right) dx \equiv u_{mi}(t, z), \quad (5.6)$$

- інтегральним оператором зворотної дії

$$F_i^{-1}[u_{mi}(t, z)] = \frac{2}{R} \sum_{i=1}^{\infty} u_{mi}(t, z) \sin\left(\frac{i\pi}{R}x\right) \equiv u_m(t, x, z); \quad (5.7)$$

- основною тотожністю інтегрального перетворення Фур'є для диференціального оператора Лапласа

$$F_i\left[\frac{\partial^2 u_m(t, x, z)}{\partial x^2}\right] = -\left(\frac{i\pi}{R}\right)^2 u_{mi}(t, z) + \frac{i\pi}{R} [u_{0m}(t, z) - (-1)^i u_{Rm}(t, z)] \quad (5.8)$$

б) по змінній  $z$  скінченне інтегральне перетворення Фур'є для обмеженого неоднорідного  $n+1$  – складового середовища з урахуванням змінних градієнтів в крайових та інтерфейсних умовах має вигляд [7]:

- інтегральний оператор прямої дії

$$F_n[[u_m(t, z)]] = \sum_{m=1}^{n+1} \int_{l_{m-1}}^{l_m} u_m(z) V_m(z, \beta_k) \sigma_m dz \equiv u_k(t), \quad (5.9)$$

- інтегральний оператор зворотної дії

$$F_n^{-1}[u_k(t)] = \sum_{k=1}^{\infty} u_k(t) \frac{V_m(z, \beta_k)}{\|V(z, \beta_k)\|^2} \equiv u_m(t, z). \quad (5.10)$$

- основна тотожність інтегрального перетворення



$$F_n \left[ L_n \left[ \left[ u_m(t, z) \right] \right] \right] = -\beta_k^2 u_k + D_{n+1} \frac{\sigma_{n+1}}{\alpha_{22}^{n+1}} V_{n+1}(l, \beta_k) \cdot g_l - D_1 \frac{\sigma_1}{\alpha_{11}^1} V_1(l_0, \beta_k) \cdot g_{l_0}, \quad (5.11)$$

де компоненти  $V_j$  спектральної вектор-функції  $V(z, \beta_k)$  визначені таким чином:

$$V_m(z, \beta_k) = \left( \prod_{i=m}^n c_{21, i} q_{i+1, k} \right) \left( \omega_{m-1, 2}(\beta_k) \cos q_{mk} z - \omega_{m-1, 1}(\beta_k) \sin q_{mk} z \right), m = \overline{1, n};$$

$$V_{n+1}(z, \beta_k) = \omega_{n2}(\beta_k) \cos q_{n+1, k} z - \omega_{n1}(\beta_k) \sin q_{n+1, k} z;$$

$$c_{21, i} = \alpha_{22}^i \beta_{12}^i - \alpha_{12}^i \beta_{22}^i;$$

$$\omega_{01}(\beta_k) = v_{11}^{01}(b_1 l_0); \quad \omega_{02}(\beta_k) = v_{11}^{02}(b_1 l_0);$$

$$\omega_{mi}(\beta_k) = \omega_{m-1, 2}(\beta_k) \psi_{1i}^m(q_m l_m, q_{m+1} l_m) - \omega_{m-1, 1}(\beta_k) \psi_{2i}^m(q_m l_m, q_{m+1} l_m);$$

$$\psi_{ji}^m(q_m l_m, q_{m+1} l_m) = v_{11}^{mj}(q_m l_m) v_{22}^{mi}(q_{m+1} l_m) - v_{21}^{mj}(q_m l_m) v_{12}^{mi}(q_{m+1} l_m);$$

$$v_{ij}^{m1}(q_s l_m) \equiv \left( \alpha_{ij}^m \frac{d}{dz} + \beta_{ij}^m \right) \cos q_s z \Big|_{z=l_m} = -\alpha_{ij}^m q_s \sin q_s l_m + \beta_{ij}^m \cos q_s l_m,$$

$$v_{ij}^{m2}(q_s l_m) \equiv \left( \alpha_{ij}^m \frac{d}{dz} + \beta_{ij}^m \right) \sin q_s z \Big|_{z=l_m} = -\alpha_{ij}^m q_s \cos q_s l_m + \beta_{ij}^m \sin q_s l_m; i, j = \overline{1, 2}, s \in \{m, m+1\}$$

$$q_{mk} = \frac{\beta_k}{\sqrt{D_m}}, \quad \gamma_m^2 \geq 0, \quad m = \overline{1, n+1},$$

тут  $\beta_k, k = \overline{0, \infty}$  - власні числа, що є коренями трансцендентного рівняння:

$$\delta_n(\beta) \equiv \omega_{n2}(\beta) v_{22}^{n+1, 1}(q_{n+1} l) - \omega_{n1}(\beta) v_{22}^{n+1, 2}(q_{n+1} l) = 0$$

$$\|V(z, \beta_k)\|^2 = \sum_{m=1}^{n+1} \int_{l_{m-1}}^{l_m} [V_m(z, \beta_k) \sigma_m]^2 dz - \text{квадрат норми,}$$

$$\sigma_m = \frac{1}{D_m} \prod_{i=m}^n \frac{c_{11, i}}{c_{21, i}}, \quad m = \overline{1, n}, \quad \sigma_{n+1} = \frac{1}{D_{n+1}}. \text{-компоненти спектральної густини.}$$

В результаті застосування інтегральних операторів (5.6), (5.9) до задачі (5.1) – (5.5) одержимо задачу Коші,

$$\frac{d}{dt} u_{ki}(t) = - \left( D_R \left( \frac{\pi i}{R} \right)^2 + \beta_k^2 \right) u_{ki}(t) + F_{ki}(\tau) \quad (5.12)$$

$$u_{ki}(t) \Big|_{t=0} = g_{ki} \quad (5.13)$$

розв'язком якої є функція [7]

$$u_{ki}(t) = e^{-\left(D_R\left(\frac{\pi i}{R}\right)^2 + \beta_k^2\right)t} g_{ki} + \int_0^t e^{-\left(D_R\left(\frac{\pi i}{R}\right)^2 + \beta_m^2\right)(t-\tau)} F_{ki}(\tau) d\tau, \quad (5.14)$$

де:

$$F_{ki}(t) = g_{ki} + \Phi_{1ki}(t) + \Phi_{2ki}(t) + f_{ki}(t);$$

$$\Phi_{1ki}(t) = \frac{\pi i}{R} \left[ u_{0k}(t) - (-1)u_{Rk}(t) \right];$$

$$\Phi_{2ki}(t) = D_{n+1} \frac{\sigma_{n+1}}{\alpha_{22}^{n+1}} V_{n+1}(l, \beta_k) g_{li}(t) - D_1 \frac{\sigma_1}{\alpha_{11}^1} V_1(l_0, \beta_k) g_{l_0i}(t);$$

$$g_{ki} = \sum_{m=1}^{n+1} g_{mki}, \quad f_{ki}(t) = \sum_{m=1}^{n+1} f_{mki}(t), \quad f_{ki}(t) = \sum_{m=1}^{n+1} f_{mki}(t), \quad g_{ki} = \sum_{m=1}^{n+1} g_{mki}(z).$$

Повертаючись до оригіналів, з послідовним застосуванням інтегральних операторів зворотної дії, визначеними формулами (5.7), (5.10), отримаємо розв'язок задачі (5.1) [7]

$$\begin{aligned} u_m(t, x, z) = & \int_0^t \int_0^R \left[ W_{l_0, m}(t-\tau; x, \zeta; z, l_0) g_{l_0}(\tau, \zeta) + W_{l_m}(t-\tau; x; \zeta; z, l) g_l(\tau, \zeta) \right] d\zeta d\tau + \\ & + \int_0^t \sum_{m_1=1}^{n+1} \int_{l_{m_1-1}}^{l_{m_1}} \left[ W_{0, m_1}(t-\tau; x, 0; z, \xi) u_{o_{m_1}}(\tau, \xi) + W_{R, m_1}(t-\tau; x; R, z, \xi) u_{R, m_1}(\tau, \xi) \right] d\xi d\tau + \\ & \int_0^R \sum_{m_1=0}^{n+1} \int_{l_{m_1-1}}^{l_{m_1}} H_{m, m_1}(t; x, \zeta; z, \xi) g_{m_1}(\zeta, \xi) \sigma_{m_1} d\xi d\zeta + \\ & + \int_0^t \int_0^R \sum_{m_1=0}^{n+1} \int_{l_{m_1-1}}^{l_{m_1}} H_{m, m_1}(t-\tau; x, \zeta; z, \xi) f_{m_1}(\tau, \zeta, \xi) \sigma_{m_1} d\xi d\zeta d\tau, \quad m = \overline{1, n+1} \end{aligned} \quad (5.15)$$

У цій формулі визначені функції впливу, які описуються наступними виразами:

- функції впливу крайових умов по просторовій змінній z:

$$W_{l_0, m}(t; x, \zeta; z, l_0) = -D_1 \frac{\sigma_1}{\alpha_{11}^1} \frac{2}{R} \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} e^{-\left(D_R\left(\frac{i\pi}{R}\right)^2 + \beta_m^2\right)t} \cdot \frac{V_1(l_0, \beta_k) \cdot V_m(z, \beta_k)}{\|V(z, \beta_k)\|^2} \sin\left(\frac{i\pi}{R} x\right), \quad (5.16)$$

$$W_{l_m}(t; x, \zeta; z, l) = D_{n+1} \frac{\sigma_{n+1}}{\alpha_{22}^{n+1}} \frac{2}{R} \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} e^{-\left(D_R\left(\frac{i\pi}{R}\right)^2 + \beta_m^2\right)t} \cdot \frac{V_{n+1}(l, \beta_k) \cdot V_m(z, \beta_k)}{\|V(z, \beta_k)\|^2} \sin\left(\frac{i\pi}{R} x\right); \quad (5.17)$$

- функції впливу крайових умов по просторовій змінній  $x$ :

$$W_{0,m_1}(t; x, 0; z, \xi) = \frac{2}{R} \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{i\pi}{R} e^{-\left(D_R \left(\frac{i\pi}{R}\right)^2 + \beta_k^2\right)t} \frac{V_1(\xi, \beta_k) \cdot V_m(z, \beta_k)}{\|V(z, \beta_k)\|^2} \sin\left(\frac{i\pi}{R} x\right), \quad (5.18)$$

$$W_{R,m_1}(t; x, R; z, \xi) = \frac{2}{R} \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{i\pi}{R} (-1)^{i+1} e^{-\left(D_R \left(\frac{i\pi}{R}\right)^2 + \beta_k^2\right)t} \frac{V_{m_1}(\xi, \beta_k) \cdot V_m(z, \beta_k)}{\|V(z, \beta_k)\|^2} \sin\left(\frac{i\pi}{R} x\right); \quad (5.19)$$

- функція впливу початкових умов та неоднорідностей системи:

$$H_{m,m_1}(t, x, \zeta; z, \xi) = \frac{2}{R} \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{m_1=1}^{\infty} e^{-\left(D_R \left(\frac{i\pi}{R}\right)^2 + \beta_m^2\right)t} \frac{V_m(z, \beta_k) V_{m_1}(\xi, \beta_m)}{\|V(z, \beta_m)\|^2} \sin\left(\frac{\pi i}{R} \zeta\right) \sin\left(\frac{\pi i}{R} x\right). \quad (5.20)$$

$$m, m_1 = \overline{1, n+1}$$

### 5.3 Вибір функціоналу-нев'язки

Вважаємо, що коефіцієнти дифузії  $D_k$ , крайової задачі (5.1) – (5.5) є невідомими функціями від часу. При відомих концентраціях  $U_{k_1}(t, z)$  як слідах розв'язків на поверхнях областей  $\gamma_{k_1} \subset \Omega_k$ ,  $k_1 = \overline{1, N+1}$ , неоднорідного середовища

$$U_{s_{k_1}}(t, z) \Big|_{\gamma_{k_1}} = f_{s_{k_1}}(t, z) \Big|_{\gamma_{k_1}}, \quad (5.21)$$

початково-крайова задача (5.1) – (5.5) може бути розглянута для кожної точки  $z$  для кожного тонкого  $k_1$ -го сегмента і полягатиме в знаходженні функцій

$$D_{sp_{k_1}} \in D, \text{ де } D = \left\{ v(t, z) : v \Big|_{\Omega_{k_1T}} \in C(\Omega_{k_1T}), v > 0, k_1 = \overline{1, N+1} \right\}.$$

Функціонал-нев'язка відхилення розв'язку від його слідів на  $\gamma_{k_1} \in \Omega_{k_1}$ , відповідно до [8] запишеться у вигляді

$$J_{k_1}(D_{k_1}) = \frac{1}{2} \int_0^T \left\| U_{k_1}(t, z, D_{k_1}) - f_{1_{k_1}} \Big|_{\gamma_{k_1}} \right\|^2 dt. \quad (5.22)$$

Регуляризаційний вираз для  $n+1$ -го кроку визначення ідентифікуючої функціональної залежності. Слідуючи [8], з використанням методу мінімальних

похибок для визначення залежності ідентифікації компоненти коефіцієнта дифузії  $D_{k_1}^{n+1}$  від часу для кожного  $m$ -го шару  $m = \overline{1, N+1}$ , отримаємо

$$D_{k_1}^{n+1}(t) = D_{k_1}^n(t) - \nabla J_{D_{k_1}^n}^n(t) \frac{\|U_{k_1}(t, \gamma_{k_1}, D_{k_1}^n) - f_{1_{k_1}}\|^2}{\|\nabla J_{D_{k_1}^n}^n(t)\|_{\gamma_{k_1}}^2}, \quad t \in (0, T); k_1 = \overline{1, N_1}. \quad (5.23)$$

Таким чином, слідуючи [8] отримуємо для задачі функціональної ідентифікації аналітичні вирази для компонентів градієнтів функціонала-нев'язки

$$\nabla J_{D_{k_1}^n}(t) = \int_{l_{k_1-1}}^{l_{k_1}} \phi_{k_1}(t, z) \frac{\partial^2}{\partial z^2} U_{k_1}(t, z) dz. \quad (5.24)$$

#### 5.4. Ідентифікація та чисельне моделювання

На рис. 5.2 приведені результати експериментальних досліджень розподілів хрому в живильнику.

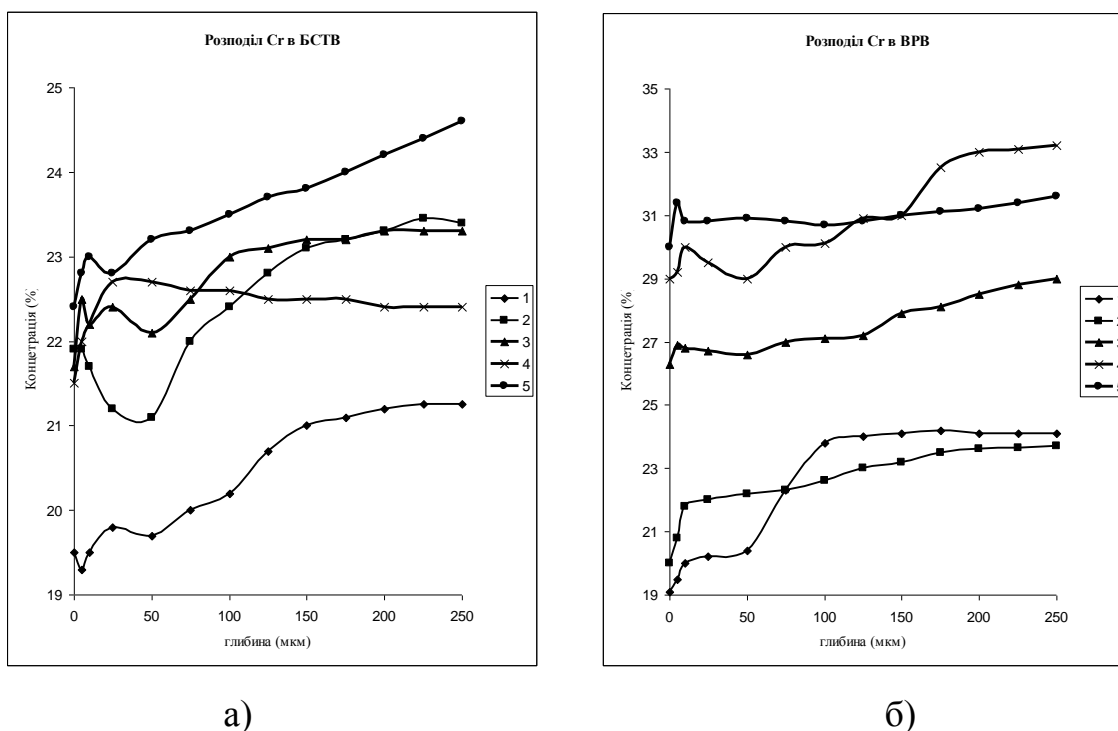


Рисунок 5.2. Розподіли хрому(Cr) в базальтовому супертонкому волокні  
а) БСТВ, б) ВРВ

Дані отримані за результатами експлуатації протягом 20 діб при виробництві базальтового супертонкого волокна (БСТВ) (рис. 5.2 а) та при

експлуатації протягом 30 діб при виробництві базальтового волокна із застосування ВРВ (рис. 5.2 б) в п'яти різних точках (1-5) матеріалу.

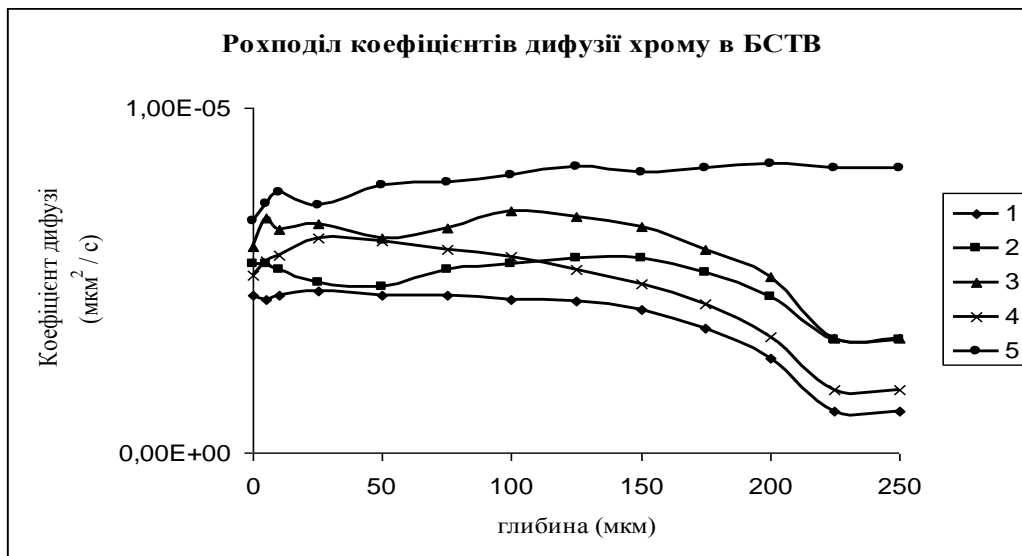


Рисунок 5.3. Розподіл коефіцієнтів дифузії хрому для БСТВ

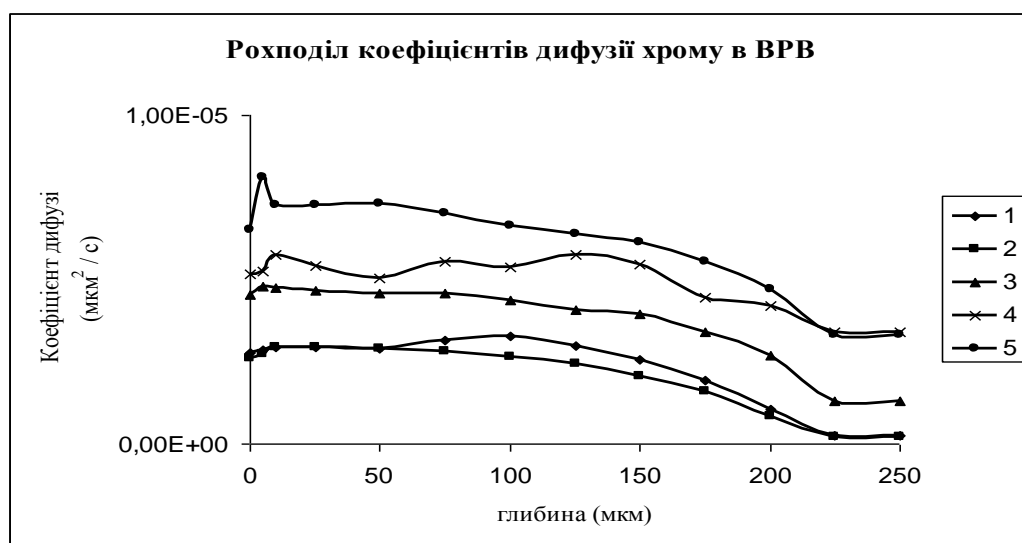


Рисунок 5.4. Розподіл коефіцієнтів дифузії хрому для ВРВ

Застосувавши до аналізу експериментальних розподілів підходи викладені та апробовані в працях авторів [8, 9, 10], які базуються на теорії оптимального керування станом розподілених систем [11-12] та запропоновану математичну модель процесу дифузійного масопереносу в багат шарових плівках, отримано розподіли коефіцієнтів дифузії хрому (Cr) в шарі середовища.

Розглянемо результати комп'ютерного моделювання концентраційних розподілів хрому в кожній з п'яти точок при виробництві ВРВ та БСТВ.

На рис. 5.5 наведено результати числового моделювання розподілу хрому при виробництві БСТВ та використані сліди експериментальних спостережень (exp), що відображають вміст хрому. Ці концентраційні розподіли побудовані для різних часових моментів формування технологічного мультишару наноплівки: приведений час, що дорівнює (1T), відповідає експериментальному часу (20 діб). Для зручності аналізу кінетики процесу дифузійного переносу, розподіли приведено для п'яти моментів часу, що умовно відповідають етапам формування захисного шару від початкового (0.25T) до кінцевого (1T).

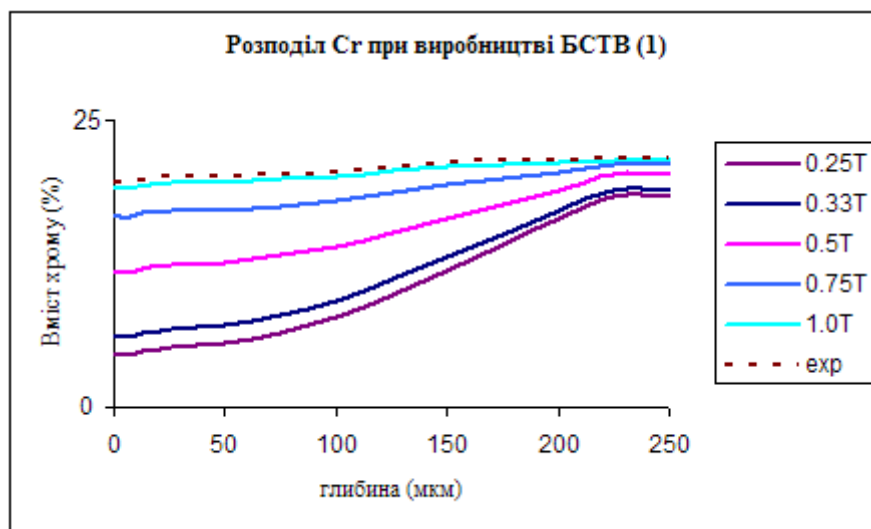
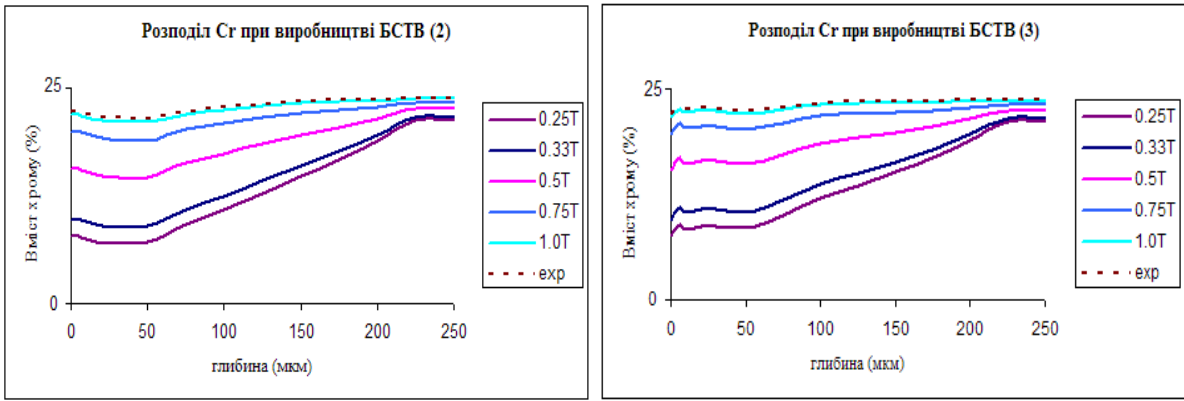


Рисунок 5.5. Модельний розподіл хрому (Cr) для БСТВ (точка 1)

Як бачимо для першого часового відтинку (0.25T), вміст хрому лінійно зростає до глибини 100 мкм, після чого розподіл набуває більшої стрімкості і стабілізується в районі 220 мкм. Чітко видно, що з кожним наступним етапом формування захисного шару розподіл набуває все більш рівномірного характеру. Так, величина градієнту для першого шару складає більше 14 %, для другого – 12,5 %, для третього – 7,5 %, для четвертого – 2,5 % та для п'ятого – 1,5 %. Найбільший приріст вмісту хрому спостерігається при приведеному часі від 0,33T до 0,75T. Максимальне відхилення концентрації хрому для періоду завершення формування мультишару наноплівки (1T) від експериментального профілю (exp) не перевищує 2 %.



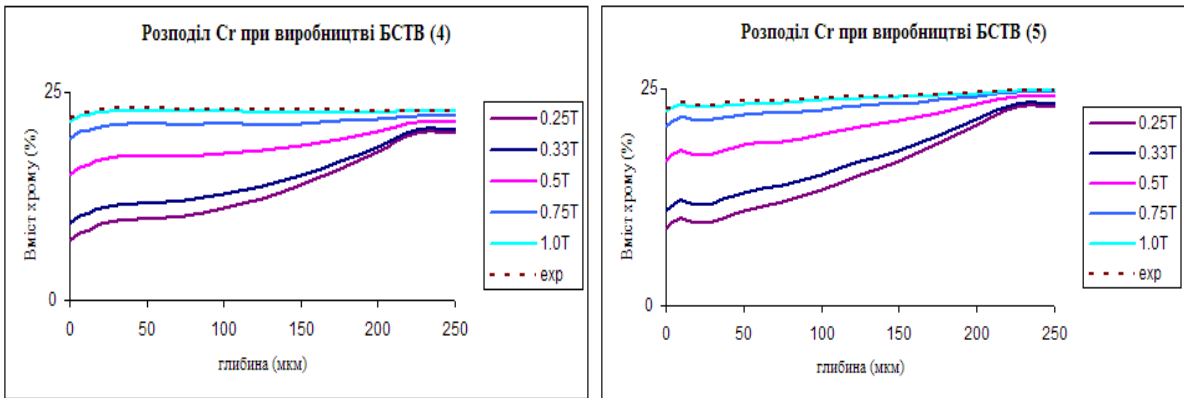
а)

б)

Рисунок 5.6. Модельний розподіл хрому (Cr) для БСТВ

а) точка 2; б) точка 3

Кінетика процесу суттєво не відрізняється і для розподілів хрому отриманих для інших чотирьох точок (2-4) представлених на рис.6 та рис. 5.7. Ми можемо спостерігати деякі флуктуації на ділянках від 0 до 50 мкм, що може бути пов'язано певною з неорідністю досліджуваного зразка, та в цілому кінетика процесу залишається сталою.



а)

б)

Рисунок 5.7. Модельний розподіл хрому (Cr) для БСТВ

а) точка 4; б) точка 5

На рис. 5.8 – 5.10 наведено результати числового моделювання розподілу хрому для ВРВ процесу. Аналогічно, приведені модельні та експериментальний розподіли (exp), вмісту хрому. Концентраційні розподіли побудовані для п'яти

часових моментів формування мультишару наноплівки і приведений час (1Т), відповідає експериментальному часу в 30 діб.

Як бачимо на рис. 5.8 криву розподіл хрому можна розділити на три характерні сегменти, перший від 0 до 50 мкм, характеризується рівномірністю розподілу, другий від 50 до 200 мкм характеризується лінійністю зростання вмісту хрому, та третій сегмент теж, як і перший, має рівномірний характер.

Величина градієнту для першого і другого шарів складають майже 16 %, для третього – 12 %, для четвертого – 8,2 % та для п'ятого – 5,7 %. Найбільший приріст вмісту хрому спостерігається при приведеному часі від 0,33Т до 0,75Т. Максимальне відхилення концентрації хрому для періоду завершення формування мультишару наноплівки (1Т) від експериментального профілю (exp) не перевищує 3 %.

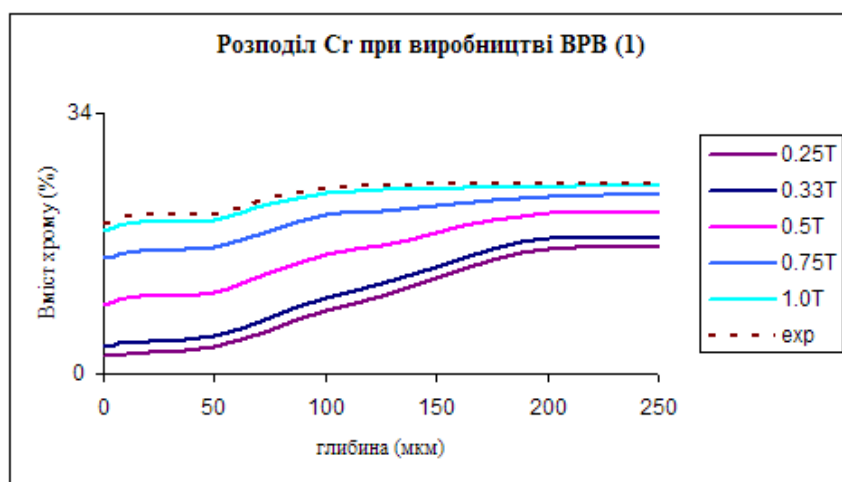
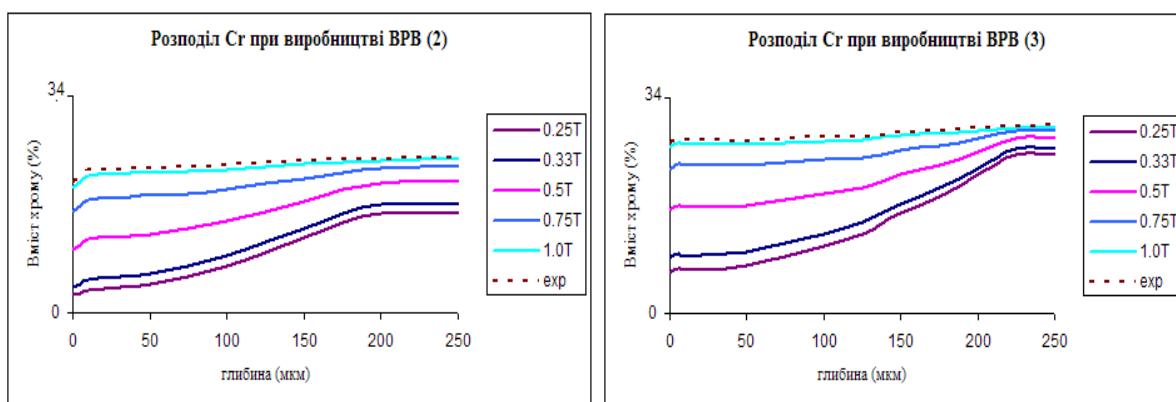


Рисунок 5.8. Модельний розподіл хрому (Cr) для ВРВ (точка 1)



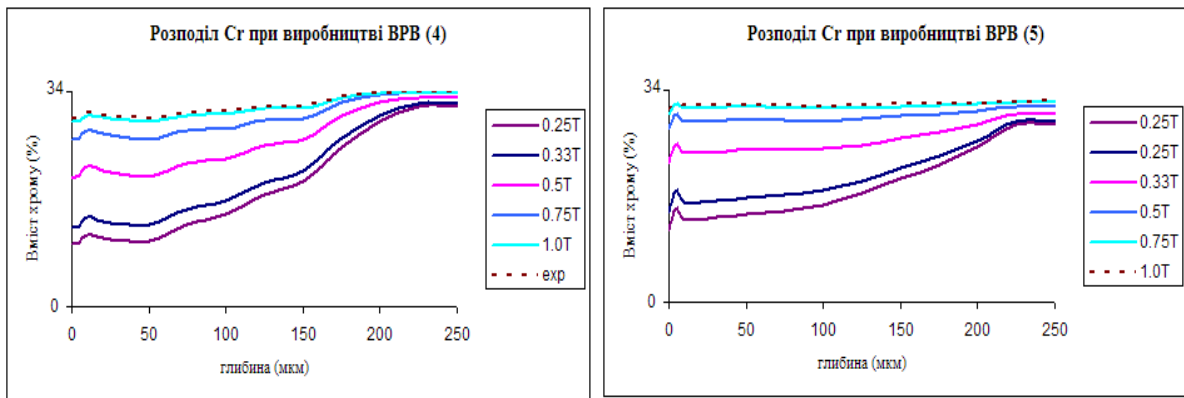
а)

б)

Рисунок 5.9. Модельний розподіл хрому (Cr) для ВРВ

а) точка 2; б) точка 3





а)

б)

Рисунок 5.10. Модельний розподіл хрому (Cr) для ВРВ (точка 4)

а) точка 4; б) точка 5

Figure 10. Modeling distribution of chromium (Cr)

а) point 4; б) point 5

Проводячи аналіз отриманих результатів (рисунки 5.5 – 5.10), варто відзначити майже повне співпадання модельного розподілу 1.0Т хрому з кривою (exp), що відповідає експериментально отриманим розподілам. Максимальні розбіжності між концентраціями для періоду завершення формування мультишару наноплівки від експериментального профілю не перевищує 3 %, що вказує на достовірність запропонованої моделі. **ВИСНОВКИ**

В монографіях представлено результати розробки методів та моделей процесів дифузійного перенесення для оцінювання технологічних параметрів багатошарових наноплівок, а також розроблено алгоритми комп'ютерної реалізації створених моделей. Найбільшими науковими та практичними результатами роботи є:

1. Побудовано математичні моделі фізико-технологічних процесів перенесення в багатошарових плівках декартового та циліндричного типу щодо різних конфігурацій багатоконпонентних середовищ.

2. Побудовано, з використанням інтегральних перетворень Фур'є, Фур'є-Бесселя та Конторовича-Лебедева для різних середовищ, аналітичні розв'язки досліджуваних математичних моделей.

3. Розроблено математичну модель дифузійного переносу в багатошарових оксидних та Fe/Tb, Dy/Fe – магнітних наноплівках різної конфігурації з урахуванням взаємодій між окремими шарами плівок та отримано її аналітичний розв'язок.

4. Здійснено комп'ютерне моделювання та аналіз концентраційних залежностей дифундованих компонентів у шарах наноплівок як функцій від товщини для різних зрізів технологічних поверхонь у широкому діапазоні зміни конструктивних і режимних параметрів для їх подальшого використання для комплексної оцінки ресурсозбереження, зокрема показників корозійності та жаростійкості оксидних плівок при виробництві тонких скловолокон.

5. Виконано перевірку на адекватність параметрів моделювання і фізичного експерименту. Встановлено, що максимальне значення величини відносної похибки експериментального і модельного розподілів концентрацій відповідних елементів не перевищує 9 % для магнітних наноплівок та 5 % для оксидних. Запропонована методика, застосована до розв'язання задачі процесу дифузії, може бути поширена на випадок більш складних багатошарових середовищ, так само як і для нелінійних систем, для яких коефіцієнт дифузії є функцією концентрації, що складатиме предмет подальших досліджень.

6. Створено програмне забезпечення для аналізу концентраційних розподілів дифундованих компонентів у різних шарах наноплівок магнітної та оксидної природи.

7. Встановлено суттєву відмінність концентрацій заліза і диспрозію на різній глибині середовища за рахунок різної інтенсивності їх дифузії в шарах. Зокрема, на глибині до 4 nm і від 10 до 12 nm спостерігається мінімальна концентрація заліза (до 20%) та максимальна концентрація диспрозію (80-95 %), а на глибині 14-20 nm – заліза 65-85 %, диспрозію 15-35 %, що впливає на збільшення перпендикулярної магнітної анізотропії та намагнічуваності в

цілому. При дослідженні оксидних плівок виявлено, що на межі сплав-повітря-розплав спостерігається 4 % концентрація алюмінію при 0,5 %-ому вмісту молібдену, що вказує на можливість технологічного формування захисного антикорозійного мультишару покриття із наперед заданими параметрами.

### СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Адамар Ж. Задача Коши для линейных уравнений с частными производными гиперболического типа / Ж. Адамар. – М.: Наука, 1978. – 352 с.
2. Арсенин В.Я. Математическая физика / В.Я. Арсенин. – М.: Наука, 1974. – 432 с.
3. Ахиезер Н.И. Лекции об интегральных преобразованиях / Н.И. Ахиезер. – Харьков: Вища школа, 1984. – 120 с.
4. Бабій Н.В. Математичне моделювання динамічних процесів дифузійного переносу в неоднорідних напівобмежених плоских магнітних середовищах / Н.В. Бабій, О.Ю. Петрик, М.Р. Петрик // Вісник ТНТУ. – 2011. – Т.16, №2. – С.187–195.
5. Бабій Н.В. Математичне моделювання масопереносу зі змінними коефіцієнтами дифузії для неоднорідних обмежених магнітних середовищ / Н.В. Бабій, М.Р. Петрик // Математичне та комп'ютерне моделювання. Серія: Технічні науки, Кам'янець-Подільський (вип.4). – 2010. – С.3–17.
6. Бабій Н.В. Математичне та чисельне моделювання систем багатокомпонентного переносу в багатошарових плівках (Fe/Dy) / Н.В. Бабій, О.Ю. Петрик // Матеріали І науково-технічної конференції ТДТУ імені Івана Пулюя – 2011. – С.53.
7. Бейтмен Г. Таблицы интегральных преобразований. Преобразования Бесселя. Интегралы от специальных функций / Г. Бейтмен, А. Эрдейи. – М.: Наука, 1970. – Т.2.– 397 с.

8. Березанский Ю.М. Разложение по собственным функциям самосопряженных операторов / Ю.М. Березанский. – К.: Наук. думка, 1965. – 798 с.
9. Березовский А.А. Лекции по нелинейным краевым задачам математической физики / А. А. Березовский. – К.: Наук. думка, 1976. – Ч. I. – 452с. – Ч. 2. – 298 с.
10. Бере Л. Уравнения с частными производными / Л. Бере, Ф. Джон, М. Шехтер. – М.: Мир, 1966. – 351 с.
11. Боголюбов Н.Н. Асимптотические методы в теории нелинейных колебаний / Н.Н. Боголюбов, Ю.А. Митропольский. – М.: Физматгиз, 1958. – 408 с.
12. Бомба А.Я. Нелінійні математичні моделі процесів геогідродинаміки / А.Я. Бомба, В.М. Булавацький, В.В. Скопецький. – К.: Наукова думка, 2007. – 308 с.
13. Бомба А.Я. Сингулярно возмущенные задачи типа “конвекция-диффузия” в многосвязных областях / А.Я. Бомба, В.В. Скопецький, И.М. Присяжнюк // Компьютерная математика. – 2004. – № 2. – С.99–104.
14. Боли Б. Теория температурных напряжений / Б. Боли, Дж. Уэйнер. – М.: Мир, 1964. – 517 с.
15. Бохнер С. Лекции об интегралах Фурье / С. Бохнер. – М.: Физматгиз, 1969. – 360 с.
16. Бремерман Г. Распределения, комплексные переменные и преобразования Фурье / Г. Бремерман. – М.: Мир, 1968. – 276 с.
17. Брычков Ю.А. Интегральные преобразования обобщенных функций / Ю.А. Брычков, А.П. Прудников // Итоги науки и техники. ВИНТИ. Матем. анализ. – 1982. – Т.20. – С.78–115.
18. Булавацький В.М. Некласичні математичні моделі процесів тепло – та масопереносу / В.М. Булавацький, Ю.Г. Кривонос, В.В. Скопецький. – Київ: Наукова думка, 2005. – 282 с.
19. Быблив О.Я. Интегральные преобразования Ханкеля 1-го рода для кусочно-однородных сегментов с применением к задачам математической физики /

- О.Я. Быблив, М.П. Ленюк // Вычисл. и прикл. математика. – 1988. – №65. – С.24–34.
20. Быблив О.Я. Интегральные преобразования Ханкеля 2-го рода для кусочно-однородных сегментов / О.Я. Быблив, М.П. Ленюк // Изв. вузов. Математика. – 1987. – №5. – С.82–85.
21. Василюк П.М. Экспрессная оценка коррозионной стойкости железохромистых сплавов / П.М. Василюк, В.П. Гаврилюк, Е.А. Марковский. – Издат. ФХИ АН СССР, 1987.
22. Василюк П. Високотемпературне руйнування залізохромових сплавів / П. Василюк // Вісник ТНТУ. – 2011. – Спецвипуск. – Частина 2. – С.173–177.
23. Василюк П.М. Повышение окалиностойкости сплавов железо-хром / П.М. Василюк, Л.И. Бутенко. – Издат. Изв АН СССР, 1989.
24. Вебстер А. Дифференциальные уравнения в частных производных математической физики / А. Вебстер, Г. Сеге. – Ч.2. – М.–Л., 1934. – 320 с.
25. Векуа И.Н. Обобщенные аналитические функции / И.Н. Векуа. – М.: Физматгиз, 1959. – 628 с.
26. Вірченко Н.О. Основні методи розв'язання задач математичної фізики / Н.О. Вірченко. – К.: Вища школа, 1987. – 370 с.
27. Вишик М.И. Краевые задачи для уравнений в частных производных в некоторых классах операторных уравнений / М.И. Вишик, О.А. Ладыженская // УМН. – 1956. – Вып.6. – С.41–97.
28. Винер Н. Интеграл Фурье и некоторые его применения / Н.Винер. – М.: Физматгиз, 1963. – 256 с.
29. Владимиров В.С. Уравнения математической физики / В.С. Владимиров. – М.: Наука, 1967. – 436 с.
30. Власюк А.П. Чисельне розв'язування задач консолідації та фільтраційного руйнування ґрунтів в умовах тепло-масопереносу методом радіальних базисних функцій / А.П. Власюк, П.М. Мартинюк. – Рівне: ред.-вид. центр НУВГП, 2010. – 286 с.

31. Гладкий А.В. Численно-аналитические методы исследования волновых процессов / А.В. Гладкий, И.В. Сергиенко, В.В. Скопецкий. – Киев: Наукова думка, 2001. – 453 с.
32. Годунов С.К. Уравнения математической физики / С.К. Годунов. – М.: Наука, 1971. – 416 с.
33. Гончаренко В.М. Основи теорії рівнянь з частинними похідними / В.М. Гончаренко. – Київ: Вища школа, 1995. – 350 с.
34. Гончаренко В.М. Нелинейные задачи для уравнений с частными производными / В. М. Гончаренко. – Чернівці: Рута, 2000. – 200 с.
35. Гординг Л. Задача Коши для гиперболических уравнений / Л. Гординг. – М.: ИЛ, 1961. – 244 с.
36. Градштейн И.С. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений / И.С. Градштейн, И.М. Рыжик. – М.: Наука, 1971. – 1108 с.
37. Гринберг Г.А. Избранные вопросы математической теории электрических и магнитных явлений / Г.А. Гринберг. – М.: Изд-во АН СССР, 1948. – 728 с.
38. Грей Э. Функции Бесселя и их приложения в физике и механике / Э. Грей, Г.Б. Метьюз. – М.: Изд-во иностр. лит., 1949. – 386 с.
39. Гюнтер Н.М. Теория потенциала и ее применение к основным задачам математической физики / Н.М. Гюнтер. – М.: Гос. изд. техн. лит., 1953. – 416 с.
40. Данфорд Н. Линейные операторы. Общая теория / Н. Данфорд, Дж. Шварц. – М.: Изд-во иностр. лит., 1962. – 895 с.
41. Дейнека В.С. Модели и методы решения задач с условиями сопряжения / В.С. Дейнека, И.В. Сергиенко, В.В. Скопецкий. – К.: Наук. думка, 1998. – 614 с.
42. Дейнека В.С. Математические модели и методы расчета задач с разрывными решениями / В.С. Дейнека, К.В. Сергиенко, В.В. Скопецкий. – Киев: Наук. думка, 1995. – 262 с.
43. Дейнека В.С. Идентификация параметров неоднородных задач диффузии в наномультитематозитах с использованием градиентных методов /

- В.С. Дейнека, М.Р. Петрик // Компьютерная математика. – 2012. – №1. – С.41–51.
44. Дейнека В.С. Математичне моделювання дифузійного перенесення в багаточарових наноплівках оксидної структури (дослідження зразка за технологією виробництва базальтового волокна) / В.С. Дейнека, М.Р. Петрик, П.М. Василюк, Н.В. Бабій // Вісник ТНТУ. – 2013. – Т.70, №2. – С.219–231.
45. Диткин В.А. Справочник по операционному исчислению / В.А. Диткин, А.П. Прудников. – М.: Высш. школа, 1965. – 465 с.
46. Елизаров А.М. Обратные краевые задачи аэрогидродинамики / А.М. Елизаров, Н.Б. Ильинский, А.В. Поташев. – М.: Наука, 1994. – 437 с.
47. Задирака В.К. Теория вычислений преобразования Фур'є / В.К. Задирака. – К.: Наук. думка, 1983. – 213 с.
48. Земаян А.Г. Интегральные преобразования обобщенных функций / А.Г. Земаян. – М.: Наука, 1974. – 399 с.
49. Карслоу Г. Теплопроводность твердых тел / Г. Карслоу, Д. Егер. – М.: Наука, 1964. – 487 с.
50. Карташов Э.М. Аналитические методы в теплопроводности твердых тел / Э.М. Карташов. – М.: Высш. школа, 1979. – 415 с.
51. Коляно Ю.М. Методы теплопроводности и температуроупругости неоднородного тела / Ю.М. Коляно. – К.: Наук. думка, 1992. – 280 с.
52. Комаров Г.М. Математичні моделі і наближені методи розв'язування нелінійних проблем термопружності: дис. ... д-ра. фіз.-мат. наук: 01.01.03 / Г.М. Комаров. – К., 1995. – 312 с.
53. Комаров Г.М. Скінченні гібридні інтегральні перетворення, породжені диференціальними рівняннями другого порядку / Г.М. Комаров, М.П. Ленюк, В.В. Мороз. – Чернівці: Прут, 2001. – 228 с.
54. Конет І.М. Температурні поля в кусково-однорідних циліндричних областях / І.М. Конет, М.П. Ленюк. – Чернівці: Прут, 2004. – 276 с.
55. Копсон Э.Т. Асимптотические разложения / Э.Т. Копсон. – М.: Мир, 1966. – 159 с.

56. Кошляков Н.С. Уравнения в частных производных математической физики / Н.С. Кошляков, Э.Б. Глинер, М.М. Смирнов. – М.: Высшая школа, 1970. – 710 с.
57. Крылов В.М. О некоторых уравнениях математической физики, имеющих приложение в технических вопросах / В.М. Крылов. – М.–Л.: 1950. – 368 с.
58. Курант Р. Методы математической физики / Р. Курант, Д. Гильберт. – М.: Физматгиз, 1951. – Т.1. – 476 с.
59. Ладыженская О.А. Краевые задачи математической физики / О.А. Ладыженская. – М.: Наука, 1973. – 408 с.
60. Лаврентьев М.А. Методы теории функций комплексного переменного / М.А. Лаврентьев, Б.В. Шабат. – М.: Наука, 1973. – 736 с.
61. Ленюк М.П. О разветвленном решении задачи Коши для одного класса гиперболических систем / М.П. Ленюк // Линейные и нелинейные краевые задачи: Сб. науч. тр. – К.: Ин-т математики АН УССР, 1971. – С.168–178.
62. Ленюк М.П. Разветвленные фундаментальные решения задачи Коши для инвариантных В–параболических операторов / М.П. Ленюк // Математическая физика и нелинейная механика. – К.: Наук. думка, 1984. – 2 (36). – С.67–73.
63. Ленюк М.П. Интегральные преобразования Ханкеля 1-го рода для составных сегментов / М.П. Ленюк. –Черновцы, 1983. – 30 с.
64. Ленюк М.П. Интегральные преобразования Ханкеля 2-го рода для составных сегментов / М.П. Ленюк. – Черновцы; 1983. – 28 с.
65. Ленюк М.П. Исследование основных краевых задач для диссипативного волнового уравнения Бесселя: Препр. / М.П. Ленюк // АН УССР. Ин-т математики; 83 – 3. – К.: 1983. – 62 с.
66. Ленюк М.П. Интегральные преобразования Фурье для кусочно–однородных неограниченных и полуограниченных сред: Препр. / М.П. Ленюк // АН УССР. Ин-т математики; 85 – 29. – К.: 1985. – 60 с.



67. Ленюк М.П. Гибридные интегральные преобразования (Фурье-Бесселя, Бесселя-Фурье, Бесселя-Бесселя, Вебера-Фурье, Вебера-Бесселя): Препр. / М.П. Ленюк // АН УССР. Ин-т математики; 85 – 28. – К.: 1985. – 64 с.
68. Ленюк М.П. Интегральные преобразования с разделенными переменными (Фурье, Ханкеля): Препр. / М.П. Ленюк // АН УССР. Ин-т математики; 83 – 4. – К.: 1983. – 60 с.
69. Ленюк М.П. Интегральное преобразование Фурье на кусочно– однородной полупрямой / М.П. Ленюк // Изв. вузов. Математика. – 1989. – №4. – С.14–18.
70. Ленюк М.П. Скінченні інтегральні перетворення Фур'є на кусково–однорідному сегменті / М.П. Ленюк // Інтегральні перетворення та їх застосування до крайових задач: зб. наук. пр. – К.: Ін-т математики АН України, 1993. – Вип.3. – С.180–195.
71. Ленюк М.П. Інтегральне перетворення типу Конторовича-Лебєдєва із спектральним параметром на кусково-однорідній полярній вісі / М.П. Ленюк, Н.В Скакальська (Бабій) // Матеріали ІХ Міжнародної Наукової Конференції імені академіка М. Кравчука, (м. Київ) – 2002.– С.116–117.
72. Ленюк М.П. Узагальнені гібридні інтегральні перетворення типу Конторовича-Лебєдєва 1-го роду – Лежандра 2-го роду із спектральним параметром / М.П. Ленюк, Н.В Скакальська (Бабій) // Вісник ТДТУ. – 2006. – Т.11, №1. – С.163–172.
73. Ленюк М.П. Інтегральні перетворення типу Конторовича-Лебєдєва / М.П. Ленюк, Г.Л. Міхалевська. – Чернівці: Прут, 2002. – 280 с.
74. Ленюк М.П. Інтегральні перетворення Фур'є, Бесселя із спектральним параметром в задачах математичного моделювання масопереносу в неоднорідних середовищах / М.П. Ленюк, М.Р. Петрик. – К.: Наукова думка, 2000. – 372.
75. Ленюк М.П. Інтегральні перетворення Фур'є із спектральним параметром на кусково-однорідній декартовій осі / М.П. Ленюк, М.Р. Петрик // Крайові задачі для диференціальних рівнянь: зб. наук. пр. – К.: Ін-т математики НАН України, 2000. – Вип.5. – С.182 – 225.

76. Ленюк М.П. Математичне моделювання дифузійного масопереносу зі спектральним параметром для  $n$ -інтерфейсних неоднорідних і нанопористих напівобмежених середовищ / М.П. Ленюк, М.Р. Петрик // Волинський математичний вісник. Серія: прикладна математика. – 2003. – Вип.1. – С.69 – 95.
77. Ленюк М.П. Математичне моделювання адсорбційного масо переносу з спектральним параметром для неоднорідних  $n$ -інтерфейсних циліндричних обмежених мікропористих середовищ з порожниною / М.П. Ленюк, М.Р. Петрик // Вісник Тернопільського державного технічного університету. – 2004. – Т.9. – №4. – С.147 – 158.
78. Ленюк М.П. О дважды разветвленном решении задачи Коши для одного класса  $B$ -параболических уравнений / М.П. Ленюк, А.Ф. Шестопап // ДАН УССР. Сер. А. – 1972. – №4. – С.321 – 325.
79. Ленюк М.П. О дважды разветвленном решении задачи Коши для одного класса параболических систем / М.П. Ленюк, А.Ф. Шестопап // Укр. мат. журн. – 1971. – №1. – С.110 – 117.
80. Лопатинский Я.Б. Теория общих граничных задач. Избранные труды / Я.Б. Лопатинский. – К.: Наук. думка, 1984. – 316 с.
81. Люстерник Л.А. Некоторые задачи для уравнений с частными производными, содержащих малый параметр / Л.А. Люстерник, О.А. Олейник // Труды 3 матем. съезда. – Т.2. – М.: Узд-во АН СССР, 1963. – С.158–169.
82. Ляшко И.И. Численное решение задач тепло- и массопереноса в пористых средах / И.И. Ляшко, Л.И. Демченко, Г.Е. Мистецкий. – Киев: Наук. думка, 1991. – 264 с.
83. Лыков А.В. Теория теплопроводности / А.В. Лыков. – М.: Высшая школа, 1967.
84. Лыков А.В. Теплопроводность и диффузия / А.В. Лыков. – М.: Гизлегпром, 1941.
85. Лыков А.В. Теория массопереноса / А.В. Лыков, Ю.А. Михайлов. – М.: Гос-энергоиздат, 1963. – 535 с.
86. Марченко В.А. Спектральная теория операторов Штурма – Лиувилля / В.А. Марченко. – К.: Наук. думка, 1972. – 220 с.

87. Мизохата С. Теория уравнений с частными производными / С. Мизохата – М.: Мир, 1977. – 504 с.
88. Митропольський Ю.А. Асимптотические решения уравнений в частных производных / Ю.А. Митропольський, Б.И. Мосеенков. – К.: Вища школа, 1976. – 592 с.
89. Митчелл Э., Уэйт Р. Метод конечных элементов для уравнений с частными производными / Э. Митчелл, Р. Уэйт. – М.: Мир, 1981. – 216 с.
90. Михайлов В.П. Дифференциальные уравнения в частных производных / В.П. Михайлов. – М.: Наука, 1983. – 424 с.
91. Мороз В.В. Скінченні гібридні інтегральні перетворення: Препр. / В.В. Мороз, М.П. Ленюк // НАН України. Ін-т. математики; 97–7. – К.: 1997. – 42 с.
92. Моисеев Н.Н. Асимптотические методы нелинейной механики / Н.Н. Моисеев. – М.: Наука, 1969. – 379 с.
93. Пасконов В.М. Численное моделирование процессов тепло- и массообмена / В.М. Пасконов, В.И. Полежаев, Л.А. Чудов. – М.: Наука, 1984. – 285 с.
94. Перестюк М.О. Теорія рівнянь математичної фізики / М.О. Перестюк, В.В. Маринець. – К.: Либідь, 2001. – 336 с.
95. Петрик М.Р. Визначення дифузійних характеристик Al в багатошарових оксидних наноплівках / М.Р. Петрик, Н.В. Бабій // Сучасні проблеми математичного моделювання та обчислювальних методів: матеріали всеукр. наук. конф. – Рівне, 2013. – С.121.
96. Петрик М.Р. Математичне моделювання адсорбційного масопереносу з спектральним параметром для неоднорідних n-інтерфейсних циліндричних необмежених нанопористих середовища / М.Р. Петрик // Крайові задачі для диференціальних рівнянь: зб. наук. пр. – К.: Ін-т. математики НАН України, 2008. – Вип.14. – С.182–195.
97. Петрик М.Р. Математичне моделювання масопереносу з спектральним параметром для неоднорідних циліндричних напівобмежених нанопористих середовищ / М.Р. Петрик // Науковий вісник Чернівецького

- університету: збірник наук. праць. – Вип.336–337. Математика. – 2007. – С.151 – 159.
98. Петрик М.Р. Математическое моделирование массопереноса в симметрических неоднородных и нанопористых средах с системой n-интерфейсных взаимодействий / М.Р. Петрик // Кибернетика и системный анализ. – 2007. – №1. – С.114 – 134.
99. Петрик М.Р. Математичне моделювання дифузійного масопереносу зі спектральним параметром для n-інтерфейсних неоднорідних і нанопористих необмежених середовищ / М.Р. Петрик // Науковий вісник Чернівецького університету: збірник наук. праць, Вип.288. Математика. – 2006. – С.90 – 99.
100. Петрик М.Р. Математичне моделювання адсорбційного масо-переносу з спектральним параметром для неоднорідних n-інтерфейсних циліндричних напівобмежених нанопористих середовищ із симетричною порожниною / М.Р. Петрик // Сучасні проблеми математичного моделювання, прогнозування та оптимізації: зб. науков. пр. – Київ. – Кам'янець-Подільський: Кам'янець-Подільський державний університет. – 2004. – С.212 – 229.
101. Петрик М.Р. Осесиметрична математична модель адсорбційного масопереносу зі спектральним параметром для напівобмеженого трискладового кусково-однорідного (по вісі z) середовища / М.Р. Петрик // Вісник Національного технічного університету „ХПИ”. Серія „Технологія машинобудування”. – 2001. – Т.3. – С.157 – 163.
102. Петрик М.Р. Математичне моделювання процесів барофільтрації та відтиску дисперсних середовищ в гвинтово-конічних фільтрувальних апаратах / М.Р. Петрик // Крайові задачі для диференціальних рівнянь: 36. наук. пр. – К.: Ін-т матем. НАН України, 1999. – Вип.4. – С.152 – 160.
103. Петрик М.Р. Математична модель процесу фільтраційного масопереносу неоднорідних середовищ у сферично-конічних необмежених каналах / М.Р. Петрик // Нелинейные задачи математической физики и их применение: зб. наук. пр. – К.: Ін-т. математики НАН України, 1999. – С.184 – 188.

104. Петрик М.Р. Математична модель процесу фільтраційного відтиску напівобмежених середовищ у плоских конічних каналах / М.Р. Петрик // Вісник Тернопільського державного технічного університету. – 1998. –Т.3, №4. – С.20 – 29.
105. Петрик М.Р. Математичне моделювання процесів барофільтрації та відтиску високодисперсних суспензій у конічно-гвинтових фільтрувальних апаратах (випадок апроксимації внутрішньої конічно-гвинтової конічно-однорідної) / М.Р. Петрик // Інтегральні перетворення та їх застосування до крайових задач: зб. наук. пр. – К.: Ін-т. математики НАН України, 1996. – Вип.11. – С.159 – 168.
106. Петрик М.Р. Одновимірна задача фільтрації та відтиску в кусково-однорідному дисперсному фільтраційному середовищі / М.Р. Петрик // Інтегральні перетворення та їх застосування до крайових задач: зб. наук. пр. – К.: Ін-т. математики НАН України, 1997. – Вип.14. – С.151 – 157.
107. Петрик М.Р. Нелінійні математичні моделі фільтрування суспензій та знеріднення стиснутих осадів / М.Р. Петрик // Нелинейные задачи математической физики и их приложения: зб. наук. пр. – К.: Ін-т. математики НАН України, 1995. – С.207 – 209.
108. Петрик М.Р. Математичне моделювання нелінійних неізотермічних процесів адсорбції та дифузії в стиснутому шарі сорбенту (узагальнений випадок для неізотермічності функції сорбційної рівноваги) / М.Р. Петрик // Інтегральні перетворення та їх застосування до крайових задач: зб. наук. пр. – К.: Ін-т. математики АН України, 1994. – Вип.7. – С.198 – 207.
109. Петрик М.Р. Математичне моделювання нелінійних динамічних задач адсорбції та дифузії для нерухомого шару адсорбенту (неізотермічний випадок) / М.Р. Петрик // Інтегральні перетворення та їх застосування до крайових задач: зб. наук. пр. – К.: Ін-т. математики АН України, 1993. – Вип.5. – С.201 – 215.
110. Петрик М.Р. Математичне моделювання екотехнологічних процесів осадження / М.Р. Петрик // Інтегральні перетворення та їх застосування до крайових задач: зб. наук. пр. – К.: Ін-т. математики АН України, 1993. – Вип.2. – С.180 – 188.

111. Петрик М.Р. Осесиметрична математична модель адсорбційного масопереносу зі спектральним параметром для обмеженого двоскладового кусково однорідного (по вісі  $z$ ) середовища / М.Р. Петрик, М.П. Баб'юк // Труды Института прикладной математики и механики НАНУ: сб. научн. труд. – Донецьк: Ін-т ПММ НАНУ, 2001. – Т.6. – С.95 – 100.
112. Петрик М. Осесиметрична математична модель адсорбційного масопереносу зі спектральним параметром для напівобмеженого двоскладового кусково-однорідного (по вісі  $r$ ) середовища / М. Петрик, М. Баб'юк // Вісник Тернопільського державного технічного університету. – 2002. – Т.7, №3. – С.96 – 102.
113. Математичне моделювання концентраційних розподілів багат шарових наноплівок оксидної структури / М.Р. Петрик, П.М. Василюк, Н.В. Бабій, О.Ю. Петрик // Вісник ТНТУ. – 2013. – Т.69, №1. – С.231 – 243.
114. Петрик М. Тривимірна нестационарна математична модель фільтраційно-дифузійного масопереносу для вирізаного циліндричного клину / М. Петрик, Т. Кукурудза // Вісник Тернопільського державного технічного університету. – 1999. – Т.4., Ч.4. – С.50 – 56.
115. Петрик М.Р. Математичне моделювання дифузійного масопереносу зі спектральним параметром для  $n$ -інтерфейсних неоднорідних і нанопористих обмежених середовищ / М.Р. Петрик, М.П. Ленюк // Волинський математичний вісник. Серія: прикладна математика. – 2004. – Вип.2. – С.59 – 84.
116. Петрик М.Р. Математическое моделирование и визуализация системы многоуровневого массопереноса в неоднородных каталитических средах нанопористых частиц / М.Р. Петрик, Ж. Фрессард // Проблемы управления и информатики. – 2008. – №5. – С.54 – 73.
117. Петрик М.Р. Математическое моделирование нелинейной конкурентивной двухкомпонентной диффузии в среде нанопористых частиц / М.Р. Петрик, Ж. Фрессард // Проблемы управления и информатики. – 2009. – №1. – С.56 – 72.
118. Перестюк М.О. Теорія рівнянь математичної фізики / М.О. Перестюк, В.В. Маринець. – К.: Либідь, 2001. – 336 с.

119. Петровский И.Г. Избранные труды: Системы уравнений с частными производными. Алгебраическая геометрия / И.Г. Петровский. – М.: Наука, 1986. – 500 с.
120. Петровский И.Г. Лекции по теории интегральных уравнений / И.Г. Петровский. – М.: Изд-во Моск. ун-та, 1984. – 136 с.
121. Подстригач Я.С. Термоупругость тел неоднородной структуры / Я.С. Подстригач, В.А. Ломакин, Ю.М. Коляно. – М.: Наука, 1984. – 368 с.
122. Положий Г.Н. Уравнения математической физики / Г.М. Положий. – М.: Высшая школа, 1964. – 560 с.
123. Привалов И.И. Введение в теорию функций комплексного переменного. 12-е изд., стереотип / И.И. Привалов. – М.: Наука, 1977. – 444 с.
124. Проценко В.С. Гибридные интегральные преобразования Фурье-Ханкеля и некоторые задачи кручения кусочно-однородных сред / В.С. Проценко, Т.Т. Кашавел // Динамика систем, несущих подвижную распределенную нагрузку. – 1978. – №1. – С.120 – 124.
125. Пташник Б.И. Некорректные граничные задачи для дифференциальных уравнений с частными производными / Б.И. Пташник. – К.: Наук. думка, 1984. – 264 с.
126. Савула Я.Г. Дослідження варіаційної задачі теплопровідності у багатосферних середовищах з тонкими включеннями / Я.Г. Савула, Л.М. Дяконюк // Вісник ЛНУ. Сер.: Прикл. матем. та інформат. – 2000. – Вип.3. – С.125 – 131.
127. Сергиенко И.В. Математическое моделирование и исследование процессов в неоднородных средах / И.В. Сергиенко, В.В. Скопецкий, В.С. Дейнека. – Киев: Наук. думка, 1991. – 432 с.
128. Сергиенко И.В. Системный анализ многокомпонентных распределенных систем / И.В. Сергиенко, В.С. Дейнека. – Киев, Наукова думка, 2009. – 638 с.
129. Скакальська Н.В. (Бабій). Інтегральне перетворення типу Конторовича-Лебедева із спектральним параметром на трискладовому сегменті // Крайові задачі для диференціальних рівнянь: зб. наук. праць. – Випуск 7. – 2001. – С.222–237.

130. Скакальська Н.В. (Бабій). Інтегральне перетворення типу Конторовича-Лебедева із спектральним параметром на тришаровій полярній вісі // Крайові задачі для диференціальних рівнянь: зб. наук. праць. – Випуск 8. – 2002. – С.134 – 150.
131. Скакальська Н.В. (Бабій). Інтегральне перетворення типу Конторовича-Лебедева із спектральним параметром на двоскладовому сегменті // Вісник ТДТУ ім. І. Пулюя. – 2002. – Т.7, №3. – С.115 – 121.
132. Скакальська Н.В. (Бабій). Інтегральне перетворення типу Конторовича-Лебедева із спектральним параметром на двоскладовій полярній вісі // Вісник ТДТУ. – 2003. – Т.8, №2. – С.127 – 136.
133. Скакальська Н.В. (Бабій) Інтегральне перетворення типу Конторовича-Лебедева із спектральним параметром на кусково-однорідному сегменті // Матеріали X Міжнародної наукової конференції імені академіка М. Кравчука (м. Київ). – 2004. – С. 233.
134. Скакальська Н.В. (Бабій). Інтегральне перетворення типу Конторовича-Лебедева із спектральним параметром на сегменті  $[r_0, r]$  з  $n$  точками спряження // Конференція молодих учених із сучасних проблем механіки і математики імені академіка Я.С. Підстригача (м. Львів). – 2004. – С.146 – 148.
135. Скакальська Н.В. (Бабій). Інтегральне перетворення типу Конторовича-Лебедева із спектральним параметром на полярній вісі  $R \geq R_0 > 0$  з  $n$  точками спряження. // Міжнародна конференція, присвячена 125-річчю від дня народження Ганса Гана (м. Чернівці). – 2004. – С.99.
136. Скакальська Н.В. (Бабій). Математичне моделювання процесу дифузії в багатошарових плівках (Fe/Dy) / Н.В. Скакальська (Бабій), М.Р. Петрик // Вісник Херсонського національного технічного університету. – 2008. – №1(31). – С.443 – 448.
137. Скакальська Н.В. (Бабій). Математичне та чисельне моделювання процесу дифузії в багатошарових плівках (Fe/Dy) / Н.В. Скакальська (Бабій), О.Ю. Петрик // Матеріали Всеукраїнської наукової конференції ТДТУ. – 2009. – С.306.



138. Скакальська Н.В. (Бабій). Моделювання концентраційних профілів процесу дифузії в багатошарових плівках // Матеріали 12 наукової конференції ТДТУ імені Івана Пулюя. – 2008. – С.250.
139. Скакальська Н.В. (Бабій). Моделювання процесу дифузії методом гібридного диференціального оператора Лежандра–Бесселя–Бесселя в необмеженому кусково-однорідному середовищі з м'якими межами // Міжнародна конференція, присвячена 60-річчю кафедри диференціальних рівнянь Чернівецького НУ ім. Ю. Федьковича (м. Чернівці). – 2006. – С.152 – 153.
140. Скакальська Н.В. (Бабій). Моделювання процесу дифузії методом гібридного диференціального оператора Лежандра–Бесселя–Бесселя в кусково-однорідному середовищі з м'якими межами // Матеріали 10 наукової конференції ТДТУ. – 2006. – С.298.
141. Скакальська Н.В. (Бабій). Моделювання процесу дифузії методом гібридного диференціального оператора (Конторовича–Лебедева)–Лежандра–Лежандра // Матеріали 11 наукової конференції ТДТУ. – 2007. – С.280.
142. Скопецький В.В. Математичне моделювання прямих та обернених задач динаміки систем з розподіленими параметрами / В.В. Скопецький, В.А. Стоян, Ю.Г. Кривоніс. – К.: Наук. думка, 2002. – 362 с.
143. Снеддон И. Преобразования Фурье / И. Снеддон. – М.: Изд-во иностр. лит., 1955. – 668 с.
144. Степанов В.В. Курс дифференциальных уравнений / В.В. Степанов. – М.: Физматгиз, 1959. – 468 с.
145. Соболев С.Л. Уравнения математической физики / С.Л. Соболев. – М.: Наука, 1966. – 444 с.
146. Тихонов А.Н. Уравнения математической физики / А.Н. Тихонов, А.А. Самарский. – М.: Наука, 1972. – 735 с.
147. Трантер К.Дж. Интегральные преобразования в математической физике / К.Дж. Трантер. – М.: Гостехтеориздат, 1956. – 204 с.
148. Трантер К.Дж. Интегральные преобразования в математической физике / К.Дж. Трантер. – М.: Гостехтеориздат, 1956. – 204 с.

149. Уфлянд Я.С. О некоторых новых интегральных преобразованиях и их приложениях к задачам математической физики / Я.С. Уфлянд // Вопросы математической физики. – Л., 1976. – С.93–106.
150. Федоткин И.М. Асимптотические методы в задачах тепломассопереноса / И.М. Федоткин, А.М. Айзен. – К.: Вища школа, 1975. – 197 с.
151. Фихтенгольц Г.М. Курс дифференциального и интегрального исчисления: В 3-х т. / Г.М. Фихтенгольц. – М.: Наука, 1969. – Т.3. – 656 с.
152. Фущич В.И. Симметричный анализ и точные решения нелинейных уравнений математической физики / В.И. Фущич, В.М. Штеленя, Н.И. Серов. – К.: Наук. думка, 1989. – 336 с.
153. Хермандер Л. Анализ линейных дифференциальных операторов с частными производными. Т.1. Теория распределений и анализ Фурье / Л. Хермандер. – М.: Мир, 1986. – 464 с.
154. Дифузійні процеси в оксидних шарах залізохромових сплавів / О. Шаблій, М. Петрик, П. Василюк, І. Катеринюк // Вісник Тернопільського державного технічного університету. – 2000. – Т.5 – №3. – С.5 – 11.
155. Шаблій О. Математичне моделювання і оптимізація систем електродифузійного масопереносу / О. Шаблій, О. Петрик, М. Петрик // Вісник ТДТУ. – 2007. – №4. – С.165 – 183.
156. Шварц Л. Математические методы для физических наук / Л. Шварц. – М.: Мир, 1965. – 412 с.
157. Шестаков В.М. Модели переноса в неоднородных пластах / В.М. Шестаков // Теория и расчеты фильтрации. – Киев: Наук. думка, 1980. – С.179–187.
158. Шилов Г.Е. Математический анализ. Второй специальный курс / Г.Е. Шилов. – М.: Наука, 1965 – 328 с.
159. Эйдельман С.Д. Параболические системы / С.Д. Эйдельман. – М.: Наука, 1964. – 444 с.
160. Эндрюс Д. Математическое моделирование: пер. с англ. / Д. Эндрюс, Р. Мак–Лоун. – М.: Мир, 1979. – 278 с.
161. Эфрос А.М. Операционное исчисление и контурные интегралы / А.М. Эфрос, А.М. Данилевский. – Харьков, 1937. – 383 с.

162. Alhumaizi K. Flux-limiting solution techniques for simulation of reaction–diffusion–convection system //Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation. – Vol.12. – 953–965, (2007).
163. Auverbach S.M. Theory and Simulation of Jump Dynamics, Diffusion and Phase Equilibrium in Nanopores// Int. Reviews in Physical Chem. – 19(2). – 155–198, (2000).
164. Barenblatt G.I., Etnov V.M., Ryzhyk V. Theory of Fluids Flow Through Natural Rocks. Dordrecht: Kluwer, (1990). – 303 p.
165. Belhachmi Z., Bernardi C. and Karageorghis A. Mortar spectral element discretization of the Laplace and Darcy equations with discontinuous coefficients// Mathematical Modelling and Numerical Analysis. ESAIM – Paris, Vol.41, No.4. – 801–824, (2007).
166. Blavette D., Cadel E., Pareige C., Deconihout B., Caron P. Phase transformation and segregation to lattice defects in Ni-base superalloys Microsc. And Microanal. – 13(5). – 1–20, (2007).
167. Bouillard N., Eymard R., Herbin R., Montarnal P. Diffusion with dissolution and precipitation in a porous medium: Mathematical analysis and numerical approximation of a simplified model // Mathematical Modelling and Numerical Analysis. ESAIM – Paris. – Vol.41, No.6. – 975–1000, (2007).
168. Bourdreau B.P. Jorgensen B.B. The benthic boundary layer. Oxford University Press, 2001.
169. Cadel E., Lemarchand D., Chambrelaud S., Blavette D. Atom probe tomography investigation of the microstructure of superalloys №18 // Acta materialia. – volume 50. – Issue 5, 2002. – P.957–966.
170. Chen N.Y., Falconer R.A. Advection-diffusion modeling using the modified quick scheme // Numerical methods fluid. – 15. – 1171–1196, (1992).
171. Chen, N.Y., T.F. Degnan and M.C. Smith, Molecular Transport and Reaction in Zeolites: Design and Application of Shape Selective Catalysis, V.C.H. Weinheim, New York, 1994.
172. Deineka V.S. Identifying kinetic parameters of mass transfer in components of multicomponent heterogeneous nanoporous media of a competitive diffusion system / Deineka V.S., Petryk M.R., Fraissard J. Cybernetics and System Analysis, Springer New York. – Vol.47, Number 5, (2011). – P.705–723.

173. Ekstrom E., Tysk J. Convenience preserving jump-diffusion models for option pricing // *J. Math. Analysis and Appl.* – 330. – 715–728, (2007).
174. Fernández M.-A., Gerbeau J.-F. and Martin V. Numerical simulation of blood flows through a porous interface // *Mathematical Modelling and Numerical Analysis. ESAIM – Paris.* – Vol.42, No.6. – 961–990, (2008).
175. Fluid Transport in Nanoporous Materials/ C.W Conner and J.Fraissard, Editors. NATO Science, Serie II: Mathematics, Physics and Chemistry. – vol.29, (2006). – 685 p.
176. Friedrichs K. Asymptotic phenomena I mathematical physics // *Bull. Amer. Math. Soc.*, 1995. – 61, №6. – P.485–504.

177. Galdikas A. The influence of surface diffusion on surface roughness and component distribution profiles during deposition of multilayers // Computational Materials Science 38. – 716–721, (2007).
178. Jiang M., Yue X. Numerical homogenization of well singularities in the flow transport through heterogeneous porous media: fully discrete scheme // Mathematical Modelling and Numerical Analysis. ESAIM – Paris. – Vol.41, No.4. – 945–958, (2007).
179. Kärger, J. and D. Ruthven, Diffusion in Zeolites and Other Microporous Solids, John Wiley & Sons, New York, 1992.
180. Kuttler K., Aifantis E.G. Existence and uniqueness in nonclassical diffusion // Quart. J. of Appl. Math, 1987. – 45. – №3. – P.549–560.
181. Lions J.L. Perturbations singulieres olsens les problemus aux linutes eten controle optimal. Springer- New York: Verlag Berlin-Heidelberg, 1973.
182. Magalhaes, F.D., R.L. Laurence, W.C. Conner, M.A. Springuel–Huet, A. Nosov and Fraissard J. Study of molecular transport in beds of zeolite crystallites: semi–quantitative modeling of  $^{129}\text{Xe}$  NMR experiments, J. Phys. Chem. B. – 101. – 2277–2284, (1997).
183. Mathiu–Blaster and J. Sicard, Thermodynamics of irrevesible processes applied to solute transport in nonsaturated porous media, J. Non Equilibrium Thermodyn. – 24. – 107–122, (1999).
184. Murase T., Iwata M., Wakita M., Adachi T., Hagashi N. and Shirato M. "Variable–Pressure / Variable–Rate Expression of Semisolid Materials", J. Chem. Eng. Jap. – 20(6). – 603, (1987).
185. Petryk M. Mathematical modeling of mass transfer in symmetric heterogeneous and nanoporous media with a system of n -interface interactions, Cybernetics and System Analysis, Springer New York. – Volume 43, Number 1. – 1060–0396 (Print) 1573–8337 (Online). – P.94–111, (2007).
186. Petryk M., Leclerc S., Canet D., Fraissard J. Mathematical modeling and visualization of gas transport in a zeolite bed using a slice selection procedure. – Diffusion Fundamentals. – Volume 4. – 11.1–11.23, (2007).
187. Petryk M., Leclerc S., Canet D., Fraissard J. Modeling of gas transport in a microporous solid using a sclice selection procedure: Application to the

- diffusion of benzene in ZSM5. *Catalysis Today*, Elsevier B.V. – Volume 139. – 234–240, (2008).
188. Petryk M., Shabliy O., Leniuk M., Vasylyuk P. “Mathematical modeling and research for diffusion processes in multilayer and nanoporous media, *Fluid Transport in Nanoporous Materials*”. NATO Science Series, Series II: Mathematics, Physics and Chemistry. – Volume 219. – 639 – 655. Springer Publishers (2006), Netherlands.
189. Petryk M., Vorobiev E. “Mass transfer from liquid containing spherical particles during the pressing of biological porous materials”, *Proceeding of the 2<sup>nd</sup> European Conference on Filtration and Separation*, Université de Technologie de Compiègne, Compiègne (France). – P.266–273, (2006).
190. Phan H. Optimal stopping controlled jump diffusion processes: a viscosity solution approach // *Math. Systems Estim Contr.* – vol.8. – 1–27, (1998).
191. Ramirez-Cuesta A., Mitchell P.C.H Hydrogen adsorption in a copper ZSM5 zeolite An inelastic neutron scattering study // *Catalysis Today* 120, (2007). – 368 –373.
192. Rodriguez-Ferran A., Sandoval M.L. Numerical performance of incomplete factorizations for 3D transient convection–diffusion problems // *Advances in Engineering Software* 38, (2007). – p.439–450.
193. Rui H., Kim S., Kim S.D. A remark on least-squares mixed element methods for reaction–diffusion problems // *Journal of Computational and Applied Mathematics* 202, (2007). – 230 – 236
194. Ruthven D.M. *Principles of Adsorption and Adsorption Processes*, John Wiley, New York, (1984). – p.194.
195. Schobol C., Suli E., Tobar R. Sparse finite elements approximation of high-dimensional transport dominated diffusion problems // *Computer and Mathematical Science.* – v.42(5), (2008). – 777 –8320.
196. Springuel–Huet, M.A., Nosov A., Kärger J., Fraissard J. <sup>129</sup>Xe NMR study of bed resistance to molecular transport in assemblages of zeolite crystallites, *J. Phys. Chem.*, 100. – 7200 –7203, (1996)
197. Talbot E., Berche P.E., Ledue D., Patte R. Magnetic properties of Fe/Dy multilayers: Monte Carlo investigation // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, (2006).

198. Talbot E., Berche P.-E., Ledue D., Patte R. Magnetic properties of Fe/Dy multilayers: A Monte Carlo investigation // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 316(2), (2007).
199. Talbot E., Ledue D., Berche P.-E. Magnetization reversal in amorphous Fe/Dy multilayers: A Monte Carlo study // *J. Appl. Phys.* 106, (2009).
200. Tamion A., Ott F., Talbot E., Bordel C., Blavette D. / Magnetization depth profile of (Fe/Dy) multilayers / *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 320, (2008). – 2650–2659.
201. Tamion, J. Juraszek, C. Bordel, Investigation of (Fe/Dy) multilayers by Fe-57 Mossbauer spectrometry. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 2007. – 313(2). – p.306–311.
202. Tamion A., Cadel E., Bordel C., Blavette D. Tree-dimensional atom probe investigation of Fe/Dy multilayers // *Scripta Materialia* (54), 2006. – 671–675.
203. Veiller L., Ledue D., and Teillet J. Monte Carlo investigation of transition and compensation temperatures of Fe/Tb multilayers // *J. Appl. Phys.* 87. – 432, (2000).
204. Veiller L., Ledue D., Teillet J.. Monte Carlo simulations of magnetic properties in multilayers // *Computational Materials Science* February, 1998. – 283–286.

Монографія

Петрик М.Р., Василюк П.М., Михалик Д.М.,  
Бабій Н.В., Петрик О.Ю.

**МОДЕЛІ ПРОЦЕСІВ ДИФУЗІЙНОГО ПЕРЕНОСУ І  
МЕТОДИ ОЦІНЮВАННЯ ПАРАМЕТРІВ В  
БАГАТОКОМПОЗИТНИХ НАНОПЛІВКАХ**

Комп'ютерне верстання *А.П. Катрич*

Формат 60x90/16. Обл. вид. арк. 11,28. Тираж 300 пр. Зам. № 2504.

Видавництво Тернопільського національного  
технічного університету імені Івана Пулюя.  
46001, м. Тернопіль, вул. Руська, 56.  
Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 4226 від 08.12.11